

THE HISTORY OF THE
CITY OF BOSTON
FROM 1630 TO 1800

BY
JOHN B. HENNINGSEN
AND
JOHN C. HENNINGSEN
WITH
AN INTRODUCTION BY
JOHN B. HENNINGSEN

BOSTON: 1900

BERECHNUNG DER ELASTISCHEN STREUUNG
NIEDERENERGETISCHER ELEKTRONEN
AN EDELGAS-UND QUECKSILBERATOMEN

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Ludwig-Maximilians-Universität München

von

HERMANN WEISS

vorgelegt im Dezember 1969

1. Referent: Dr. H.J. Meister

2. Referent: Prof.Dr. F.Bopp

Tag der mündlichen Prüfung: 4.2.1970



Herrn Dr. H.J. Meister danke ich für zahlreiche fördernde Diskussionen und kritische Bemerkungen. Herrn Prof. Dr. F. Bopp bin ich für sein Interesse an dieser Arbeit verbunden. Mein Dank gilt auch Frau Prof. Dr. C. Froese-Fischer, Vancouver, für die Bereitstellung von Atompotentialen, Herrn Prof. Dr. R. Gaspar, Debrecen, für Ratschläge in der Statistik des Atoms, Herrn Dr. J. Mehr, Bogota, und Herrn Dr. K. Schackert, Mainz, für die Mitteilung der Resultate der Streuung an den Edelgasen sowie Herrn Prof. Dr. H. Deichsel, Herrn Dr. E. Reichert, Mainz, und Herrn Dr. J. Kessler, Karlsruhe, und ihren Mitarbeitern für die wertvolle Zusammenarbeit. Ebenfalls zu Dank verpflichtet bin ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft für finanzielle Unterstützung sowie dem Leibniz-Rechenzentrum der Bayer. Akademie der Wissenschaften München, an dem die numerischen Rechnungen durchgeführt wurden.

Inhaltsverzeichnis.

	Seite
Einleitung	6
1. Analogie zwischen Elektronenstreuung und Lichtbeugung	8
2. Ableitung der Gleichungen für die Potentialstreuung	12
2.1 Theorie ohne Austausch	12
2.2 Das effektive Potential V_a	14
2.3 Das Polarisierungspotential V_p	15
2.4 Das statistische Austauschpotential V_{ex}	16
2.5 Die Partialwellenmethode für die Diracgleichung	19
3. Numerische Behandlung	22
3.1 Differentialgleichung zur Bestimmung der Phasen	22
3.1.1 Anfangswertbestimmung	23
3.1.2 Behandlung der Potentiale	23
3.1.3 Das Integrationsverfahren	25
3.2 Die Algolprogramme	25
4. Resultate für die Streuung an Ne, A, Kr, Xe und Hg	27
4.1 Rechnungen ohne Parametervariation	27
4.1.1 Rechnungen mit $V_a + V_p$	27
4.1.2 Rechnungen mit $V_a + V_p + V_{ex}$	27
4.2 Rechnungen mit Parametervariation	28
4.2.1 Rechnungen mit $V_a + V_{ex} + V_p(f)$	29
4.2.2 Rechnungen mit $V_a + V_p(f)$	29
4.2.3 Rechnungen mit $V_a + V_p(f, \beta)$	30
4.3 $V_p(f)$ als Austauschpotential	30
Abbildungen	33
Literaturverzeichnis	61

Zusammenfassung.

Bei der elastischen Streuung von Elektronen an Edelgas- und Quecksilberatomen treten bei Energien unterhalb ca. 100 eV im differentiellen Wirkungsquerschnitt und in der Spinpolarisation in zunehmendem Maße Diskrepanzen zwischen experimentell und theoretisch ermittelten Werten auf. Dies wird dem Elektronenaustausch und der Polarisierung der Atomhülle zugeschrieben, welche bei niederen Einschußenergien an Einfluß gewinnen und in der einfachen Mott-Theorie nicht berücksichtigt werden. Es ist das Ziel dieser Arbeit, beide Effekte innerhalb der Potentialtheorie durch, zu dem Atompotential $V_a(r)$, zusätzliche radialsymmetrische Potentiale zu simulieren und zwar durch das statistische Austauschpotential

$$V_{ex}(r) = \left[\frac{3}{4\pi^2} \Delta V_a(r) \right]^{1/3}$$

und das Polarisierungspotential

$$V_p(r) = \frac{\beta}{2r^4} \left[1 - \exp \left(- \left(\frac{r}{R_0} \right)^8 \right) \right],$$

wobei β die Polarisierbarkeit des Atoms ist und R_0 die Lage des Maximums von V_p angibt.

Es zeigt sich, daß V_{ex} wenig geeignet ist, Übereinstimmung von Theorie und Experiment zu erhalten. Variiert man hingegen den von der Theorie her an und für sich fest vorgegebenen Wert von R_0 in V_p , so erhält man mit diesem Zusatzpotential für die Streuung an A, Kr und Hg eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentell und theoretisch ermittelten Streuwerten. Es wird behauptet, daß durch die Variation von R_0 neben der Polarisierung auch der Austausch durch V_p simuliert wird und dieser der maßgebliche Effekt bei der niederenergetischen Elektronenstreuung ist. Die, trotz der Verwendung von V_p , noch vorhandene Diskrepanz der Streuwerte von Theorie und Experiment bei Ne und Xe wird durch zusätzliche Variation von β gemildert.

Einleitung.

Die elastische Streuung von Elektronen an Atomen ist seit einem Jahrzehnt Gegenstand intensiver experimenteller und theoretischer Untersuchungen. Einen Überblick über die Ergebnisse gibt J. Kessler ¹. Das wesentliche Resultat ist, daß in einem weiten Energiebereich der einfallenden Elektronen eine auffallend gute Übereinstimmung der, aufgrund der Mott-Theorie ², berechneten Ergebnisse mit dem Experiment vorhanden ist. Das gilt für die beiden wichtigen Streugrößen, den differentiellen Wirkungsquerschnitt und die Spinpolarisation, und zwar sowohl für die Streuung an Quecksilber ³⁻⁶ als auch an den Edelgasen ⁷⁻⁸. Jedoch für Energien unterhalb ca. 100 eV tritt eine zunehmende Diskrepanz von Theorie und Experiment auf ⁹. Dies wird dem Umstand zugeschrieben, daß bei niederen Energien Effekte Einfluß gewinnen, welche in der Theorie von Mott nicht enthalten sind, nämlich Elektronenaustausch und Polarisierung der Elektronenhülle des streuenden Atoms.

Ziel dieser Arbeit ist es, die elastische Streuung bei diesen niederen Einfallensenergien zu berechnen. Da hierbei $v/c < 10^{-2}$ ist, liegt zunächst die Vermutung nahe, daß eine nichtrelativistische Rechnung genügen sollte. Wenn man aber bedenkt, daß die Elektronen zum Atom hin beschleunigt werden, und zwar umso stärker je größer das Potential, d.h. je höher die Ordnungszahl des Atoms ist, so verwundert es nicht, daß dieses Problem - relativistische oder nichtrelativistische Rechnung - in der Literatur verschieden beantwortet wird ¹⁰⁻¹³. Während diese Autoren die Streuphasen und den differentiellen Wirkungsquerschnitt, berechnet mit der Dirac- bzw. Schrödingergleichung, miteinander vergleichen, haben wir zur Klärung des Problems für die nichtrelativistischen Rechnungen die 2. nichtrelativistische Näherung der Diracgleichung verwendet, welche einen Spin-Bahn-Kopplungsterm enthält und so auch die nichtrelativistische Berechnung der Spinpolarisation gestattet, welche sich als sehr empfindliche Vergleichsgröße erwies. Das Ergebnis dieser Untersuchungen ist, daß bei Atomen kleiner Ordnungszahl eine nichtrelativistische Näherung genügend ist, während bei schweren Atomen unbedingt relativistisch gerechnet werden muß ¹⁴.

Es erhebt sich nun die Frage, wie wir die oben erwähnten Effekte

des Austausches und der Hüllenpolarisierung theoretisch behandeln wollen. Es bietet sich hier die bereits bei ähnlichen Mehrteilchenproblemen, wie Berechnung von Oszillatorenstärken und Energiezuständen von Atomen, verwendete Methode der radial-symmetrischen Zusatzpotentiale an, welche erlaubt, diese Mehrkörpereffekte innerhalb einer Potentialtheorie zu berücksichtigen, d.h. daß der mathematische Apparat verhältnismäßig einfach bleibt und mit Hilfe einer elektronischen Rechenmaschine in annehmbaren Zeiten bewältigt werden kann. Aufgrund der Annahme, daß also das System Elektron + Atom durch ein radial-symmetrisches Potential repräsentiert wird, ergeben sich einige, in Kap. 1 wiedergegebene, schöne Analogien zur Lichtbeugung. Das Potential, welches den Elektronenaustausch simulieren soll, wird aus quantenstatistischen Überlegungen gewonnen, während das Polarisierungspotential aus der klassischen Annahme abgeleitet wird, daß in großer Entfernung vom Atom das einfallende Elektron einen Dipol induziert.

Die, unter Verwendung des Atompotentials und dieser Zusatzpotentiale, mit Hilfe der Partialwellenmethode erhaltenen Streuergebnisse stimmen mit den Experimenten noch nicht befriedigend überein. Es werden deshalb im Polarisierungspotential auftretende Konstanten zu variierbaren Parametern erklärt. Es gelingt damit - ohne Verwendung des statistischen Austauschpotentials - für die Streuung an Argon, Krypton und Quecksilber eine gute Übereinstimmung von Theorie und Experiment zu erzielen. Ferner wird die Vermutung, daß durch entsprechende Variation dieser Parameter des Polarisierungspotentials auch der Elektronenaustausch berücksichtigt wird, bekräftigt und darüberhinaus festgestellt, daß bei der elastischen Streuung von Elektronen im von uns untersuchten Energiebereich der Austausch gegenüber der Polarisierung der wesentlich einflußreichere Effekt ist.

1. Analogie zwischen Elektronenstreuung und Lichtbeugung.

Betrachtet man die Struktur des differentiellen Wirkungsquerschnittes I als Funktion des Streuwinkels θ bei der elastischen Streuung von Elektronen an Edelgasen und Quecksilber, so fällt auf, daß sie jeweils in einem bestimmten Energiebereich der einfallenden Elektronen Ähnlichkeit mit der Intensitätsverteilung hat, die man bei der Beugung von Licht an kreisförmigen Blenden erhält. Dieser Energiebereich ist vom Streuzentrum abhängig und liegt zwischen 20 eV und 140 eV bei Argon, 500 eV bei Krypton, 1000 eV bei Xenon ^{7,15} und 2500 eV bei Quecksilber ¹⁶⁻¹⁸. Es liegt deshalb nahe, die Vorstellungen aus der Optik auf das Elektron als Materiewelle und das Atom als kreisförmige Scheibe anzuwenden. In der Sprache der Lichtbeugung haben wir es bei der Elektron-Atom Streuung mit Fraunhofer'scher Beugung zu tun, d.h. Quelle und Aufpunkt sind beide sehr weit von der Scheibe entfernt. Nach bekannten Theorien ¹⁹ und mit Hilfe des Babinet'schen Theorems gilt dann

$$d/\lambda = f_1 / \sin \theta_1, \quad (1)$$

wobei d der Radius des Atoms und λ die de Broglie Wellenlänge des mit der Energie $E[\text{eV}]$ einfallenden Elektrons ist

$$\lambda \approx \sqrt{\frac{150}{E}} \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 1.9 \sqrt{\frac{150}{E}} a_0; \quad (2)$$

a_0 ist der Bohr'sche Wasserstoffradius, θ_1 sind die Lagen der Minima von $I(\theta)$, f_1 sind Faktoren

$$f_1 = 0.61, f_2 = 1.12, f_3 = 1.62, \dots$$

Dabei werden nur Minima von $I(\theta)$ berücksichtigt, für welche $\theta \leq 90^\circ$ ist, da bei der Theorie der Lichtbeugung 90° der maximale Beugungswinkel ist. Wir untersuchen nun, inwieweit (1) bei der Elektronenstreuung erfüllt ist. Dazu ermitteln wir für das jeweilige Atom den Energiebereich, in dem (1) am besten gilt:

Helium, Neon: Keine Beugungsstruktur ¹⁵.

Argon ¹⁵: Es ist ein Minimum von I vorhanden. Bestes Beugungsbild ist bei 120 eV mit einem θ_1 von 60° , also $d/\lambda = 0.7$.

Krypton ¹⁵: Hier sind bereits zwei Beugungsminima zu sehen und zwar

E [eV]	θ_1	θ_2	$(d/\lambda)_1$	$(d/\lambda)_2$
140	40	87	0.93	1.12
160	38	85	1	1.12
180	38	84	1	1.12
200	40	82	0.93	1.12

Am besten ist also (1), wonach d/λ konstant sein soll, bei 160 eV bzw. 180 eV erfüllt.

Xenon¹⁵: Hier gibt es drei Minima von $I(\theta)$:

E [eV]	θ_1	θ_2	θ_3	$(d/\lambda)_1$	$(d/\lambda)_2$	$(d/\lambda)_3$
30	55	90	-	0.74	1.12	-
60	38	70	86	1	1.18	1.62
70	33	70	90	1.1	1.18	1.62
80	32	70	-	1.1	1.18	-
150	28	52	-	1.3	1.44	-
200	28	52	-	1.3	1.3	-

Bestes Beugungsbild ist bei 200 eV.

Quecksilber¹⁶:

E [eV]	θ_1	θ_2	$(d/\lambda)_1$	$(d/\lambda)_2$
200	40	90	0.95	1.12
300	35	76	1.07	1.04
400	34	72	1.12	1.05
500	33	68	1.12	1.08

Beste Übereinstimmung von $(d/\lambda)_1$ und $(d/\lambda)_2$ ist also bei 300 eV.

Wir berechnen nun mit (1) und (2) den "optischen Atomradius" d für die Energie, bei der das beste Beugungsbild auftritt und vergleichen ihn mit Atomradien, welche auf andere Weise berechnet werden.

Atom	E [eV]	d/λ	$\lambda [a_0]$	$d [a_0]$	$s_0 [a_0]$	s_0/d	$r [a_0]$
A	120	0.7	2.1	1.47	3.2	2.15	1.8
Kr	160	1	1.9	1.9	3.4	1.8	2.1
Xe	200	1.3	1.65	2.15	3.8	1.76	2.1
Hg	300	1.07	1.34	1.4	2.7	1.94	1.5

s_0 ist die halbe Entfernung zweier Atome, in der ihre gegenseitige potentielle Energie nach Durchlauf der Potentialmulde gleich 0 ist. Die Berechnungen wurden mit einem sog. "Zwölf-sechs-Potential" $V_A + V_B$ durchgeführt, mit dem Abstoßungsterm $V_A \sim 1/r^{12}$ und dem Anziehungsterm $V_B \sim 1/r^6$. s_0 ist also eine mögliche Definition des Atomradius (siehe ²⁰). $r = (3V/4\pi)^{1/3}$, mit dem Atomvolumen $V = \text{Verbindungsgewicht} / \text{spez. Gewicht}$ ²¹; r ist somit ebenfalls ein Maß für den Atomradius. Wir entnehmen obiger Tabelle:

1. d/λ ist in der Größenordnung 1, was auch in der Optik Gewähr für ausgeprägte Beugung ist.
2. Vergleicht man d, s_0 und r für die verschiedenen Elemente, so stimmen sie in der Tendenz gut überein: Zunahme von A über Kr zu Xe, Abnahme der Werte für Hg unter die für A.
3. s_0/d nimmt von A über Kr zu Xe ab, d.h. je höher die Ordnungszahl (bei ähnlicher Gestalt der Atome) desto besser stimmen die auf verschiedene Weise erhaltenen Atomradien überein, das Atom nähert sich mehr und mehr einem kompakten Teilchen.

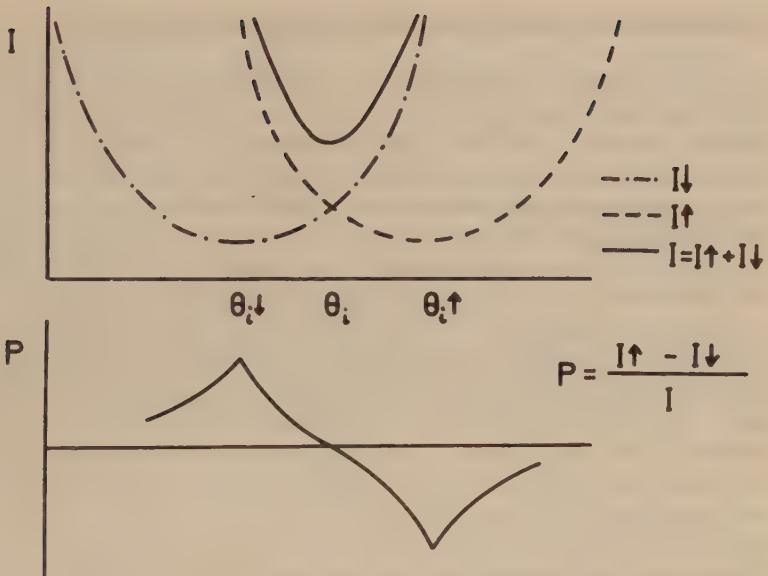
Durch diese Analogie zwischen Elektronenstreuung und Lichtbeugung gerechtfertigt, wenden wir diese Beugungsvorstellung auf die Spinpolarisation des gestreuten Elektrons an: Das auf das Atom zufliegende Elektron sieht ein Magnetfeld $\alpha \vec{v} \times \nabla V = -\alpha \vec{v} \times \vec{E}$. Die potentielle Energie des Elektrons im Felde des Atoms ist also

$$V_{\text{ges}} = V_0 + \vec{\mu} \cdot \vec{B} = V_0 + \alpha \vec{\mu} \cdot (\vec{v} \times \nabla V) \quad (3)$$

und unterscheidet sich, je nachdem das magnetische Moment $+\vec{\mu}$ oder $-\vec{\mu}$ beträgt um $2\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. In die Sprache der Optik übersetzt heißt das, daß der Atomradius d für verschiedene Spinstellung verschieden ist und damit sich nach (1) die Lage der Minima von $I(\theta)$

$$\theta_1 = \arcsin(f_1 \lambda / d)$$

für "spin up" und "spin down" unterscheidet. Daraus ergibt sich ein Umschlagen der Spinpolarisation $P(\theta)$ von einem hohen positiven zu einem hohen negativen Wert in der Umgebung von θ_1 . In der Skizze auf der folgenden Seite ist dieses Verhalten von differentielltem Wirkungsquerschnitt und Spinpolarisation schematisch dargestellt.



Schießt man also einen unpolarisierten Strahl, repräsentiert durch eine gleiche Anzahl $\uparrow$ - und $\downarrow$ -Elektronen, auf das Atom, so erwartet man in den Intensitätsminima einen Verlauf von $P(\theta)$ in der gezeichneten Art. Diese qualitative Aussage wird durch Theorie³ und Experiment¹ bestätigt. Da wir bei niedrigen Energien aus dem Beugungsbereich herauskommen, werden wir hier keine hohen Spinpolarisationen erwarten. Dies ist allerdings nur bedingt zutreffend, da, wie wir sehen werden (vgl. 2.5), hohe Polarisationsgrade allein bei genügend kleinem $I(\theta)$ auftreten können.

2. Ableitung der Gleichungen für die Potentialstreuung.

Zur exakten Lösung des Problems der elastischen Streuung von Elektronen an Atomen müßte ein Vielteilchensystem behandelt werden: Ein Elektron trifft auf eine Ansammlung von Neutronen, Protonen (Kern) und Elektronen (Hülle), welche bei unendlicher Entfernung des Elektrons ein Atom im Grundzustand bilden. Nach der Wechselwirkung mit diesem Ensemble hinterläßt das Elektron dieses wieder in seinem Grundzustand. Das unendliche System von Integrodifferentialgleichungen, welches diesen Vorgang beschreibt²², ist dermaßen kompliziert und unübersichtlich, daß es nicht als Ausgangspunkt unserer Betrachtungen dient. Es ist ohnehin für große Teilchenzahlen, wie sie bei der Streuung an den Edelgasen und an Quecksilber auftreten, vollkommen unlösbar. Wesentlich einfacher ist das Problem ohne Berücksichtigung des Austausches, d.h. ohne Symmetrisierung der Wellenfunktionen, zu behandeln. Dies geschieht in 2.1. Aber auch hier werden wir drastische Näherungen machen müssen, welche schließlich zur Potentialstreuung führen. Die dabei vernachlässigten Terme versuchen wir in 2.3 durch ein radialsymmetrisches Zusatzpotential zu simulieren. Den Elektronenaustausch werden wir ebenfalls nachträglich durch ein radialsymmetrisches Potential, gewonnen aus der Hartree-Fock'schen Methode zusammen mit quantenstatistischen Überlegungen einführen.

2.1 Theorie ohne Austausch.

Vor der Streuung, bei sehr großer Entfernung der Stoßpartner, sei $u(\vec{k}, \vec{r})$ die Wellenfunktion des einfallenden Elektrons mit $\vec{k}$ als Impuls- und $\vec{r}$ als Ortsvektor sowie $\varphi_\nu(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$ die Wellenfunktionen des Atoms mit n Hüllenelektronen, wobei ν den gesamten Satz von Quantenzahlen repräsentieren soll. Die Menge der Funktionen $\{\varphi_\nu, u\}$ bilde ein vollständiges orthonormiertes System. Dann läßt sich die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$ für das wechselwirkende System Atom+Elektron ohne Berücksichtigung des Austausches entwickeln in

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \sum_{\nu} \int \varphi_{\nu}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) u(\vec{k}, \vec{r}) a_{\nu}(\vec{k}) d^3\vec{k}$$

und man erhält mit der Abkürzung

$$F_v(\vec{r}) = \int u(\vec{k}, \vec{r}) a_v(\vec{k}) d^3\vec{k} \quad \text{schließlich}$$

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \sum_v g_v(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) F_v(\vec{r}) . \quad (4)$$

Vor und nach der Streuung ist das Atom im Grundzustand; wir suchen also für das Elektron jene Amplitude, für welche das Atom im Grundzustand g_0 ist, nämlich $\langle g_0 | \psi \rangle$ und erhalten dafür mit (4)

$$F_0(\vec{r}) = \langle g_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) | \psi(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \rangle .$$

Das Problem ist völlig bestimmt, wenn wir wie üblich annehmen, daß das einfallende Elektron asymptotisch durch eine ebene Welle und das gestreute durch eine Kugelwelle repräsentiert wird:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} F_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} .$$

Daraus ergibt sich dann der differentielle Wirkungsquerschnitt zu $I = |f(\vartheta, \varphi)|^2$.

Nun zur Lösung des Problems: Der Hamiltonoperator des Systems Elektron + Atom sei

$$H = H_a + H_e + H_w \quad (5)$$

mit H_a als Operator des Atoms, H_e als der des Elektrons und H_w als Wechselwirkungsoperator. Ferner gelte die Eigenwertgleichung für das Atom

$$H_a g_v(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = E_v g_v . \quad (6)$$

Zu lösen ist nun die Gleichung

$$(H - E) \psi(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = 0 . \quad (7)$$

Setzen wir (4) in (7) ein, so erhalten wir mit (6)

$$\sum_v [(E_v - E) g_v F_v + g_v H_e F_v + H_w g_v F_v] = 0 .$$

Multiplikation dieser Gleichung mit g_n^* und Integration über $d^3\vec{r}_1 \dots d^3\vec{r}_n$ liefert

$$(E_n - E + H_e) F_n(\vec{r}) + \sum_v U_{nv}(\vec{r}) F_v(\vec{r}) = 0 \quad (8)$$

$$U_{nv}(\vec{r}) := \int g_n^* H_w g_v d^3\vec{r}_1 \dots d^3\vec{r}_n .$$

Dieses unendliche Differentialgleichungssystem zur Ermittlung von $F_0(\vec{r})$ kann in verschiedenen Stufen der Approximation behan-

delt werden. Die einfachste und hier verwendete ist die Potentialstreuung, bei der alle $U_{ij}, i \neq j$, gegenüber U_{ii} vernachlässigt werden. Man erhält dann die Gleichung

$$(H_e + U_{00} - W)F_0 = 0, \quad (9)$$

wobei W die Energie des einfallenden Elektrons ist:

$$E = W + E_0, \quad W = 1/(\alpha^2 \sqrt{1-\beta^2}), \quad \beta = v\alpha^\dagger \quad (10)$$

2.2 Das effektive Potential V_a .

Nach (8) ist U_{00} der Erwartungswert des Wechselwirkungsoperators H_w gebildet mit der Wellenfunktion des Atoms im Grundzustand. Bis auf einen Versuch, in dem auch Spin-Spin-Wechselwirkung unter den Elektronen angenommen wird²³, beschränkt man sich üblicherweise auf Coulombwechselwirkung:

$$H_w = -\frac{Z}{r} + \sum_{i=1}^Z \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_i|}, \quad Z \text{ Ordnungszahl des Atoms.}$$

Der Erwartungswert

$$V_a := U_{00} = -\frac{Z}{r} + \int \varphi_0^* \sum_i \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} \varphi_0 d^3\vec{r}_1, \dots, d^3\vec{r}_n \quad (11)$$

liefert dann gerade die verschiedenen radialsymmetrischen Atompotentiale. Sie unterscheiden sich durch die Wahl der Atomwellenfunktionen φ_0 , welche mit Hilfe der "self consistent-field"-Methode erhalten werden: Sie können relativistisch oder nicht-relativistisch, d.h. mit der Dirac- bzw. Schrödingergleichung, gewonnen werden, und es kann bei ihrer Berechnung der Austausch^{††} berücksichtigt oder vernachlässigt werden, d.h. man benützt die

[†] Alle Gleichungen und numerischen Werte werden in Hartree (atomaren) Einheiten angegeben; insbesondere ist die Längeneinheit $a_0 = 0.529167 \cdot 10^{-8}$ cm; Die Einheit der Geschwindigkeit ist $v_0 = \alpha c$ cm/sec., wenn $\alpha = 7.29729 \cdot 10^{-3}$ die Feinstrukturkonstante und c die Lichtgeschwindigkeit ist.

^{††} Die Berücksichtigung des Austausches bei der Berechnung der φ_0 darf nicht verwechselt werden mit dem Austausch des einfallenden Elektrons mit den Elektronen der Atomhülle, welcher bis hier vernachlässigt wurde.

Hartree-Fock bzw. Hartree Gleichungen. Wir verwendeten für die Berechnung der Streuung an Hg das relativistische Hartree Potential von Mayers²⁴, für Ne bei 5 eV das nichtrelativistische Hartree-Fock Potential von Froese²⁵, für die anderen Energien bei Ne das entsprechende Potential von Clementi²⁶ und für die übrigen Edelgase die relativistischen Hartree-Fock-Slater Potentiale von Libermann et al.²⁷. Diese Potentiale unterscheiden sich vom einfachen Coulombpotential $-\frac{Z}{r}$ durch ihren rascheren Abfall mit wachsendem r , d.h. das Kernpotential ist durch die Atomhülle abgeschirmt.

2.3 Das Polarisierungspotential V_p .

Wie aus 2.1 ersichtlich, ist die Potentialstreuung ein sehr vereinfachtes Verfahren die Streuung zu behandeln. Trotzdem liefert sie befriedigende Ergebnisse. $P(\theta)$ und $I(\theta)$ stimmen in einem weiten Energiebereich mit den Experimenten überein. Dabei ist eine umso bessere Übereinstimmung festzustellen je höher die Ordnungszahl des Atoms ist. Dies ist plausibel, da eine Ansammlung von vielen Teilchen summarischer, also durch ein gemitteltes Potential, beschrieben werden kann als eine solche von nur wenigen Teilchen. Daß die Übereinstimmung von Theorie und Experiment bei niederen Energien trotz der hohen Ordnungszahl schlechter wird, kann so verstanden werden, daß hier das Elektron durch sein langsames Eindringen in den Atomverband dessen Struktur eher "sieht" als bei hohen Energien, bei denen es schnell vorbei fliegt. Deshalb erwartet man, daß die Mehrkörpereffekte von Austausch und Polarisierung von Bedeutung werden.

Die Polarisierung, welche in den Matrixelementen $U_{ij}, i \neq j$, enthalten ist, wurde bei deren Vernachlässigung im Übergang zur Potentialtheorie in 2.1 nicht berücksichtigt. Wir versuchen diese Unterlassungssünde dadurch wieder gutzumachen, daß wir die durch das vorbeifliegende Elektron verursachte Verzerrung der Atomhülle durch einen Mittelwert beschreiben: In großer Entfernung vom Atom induziert das einfallende Elektron durch sein elektrisches Feld $\vec{E} = -\vec{r}/r^3$ in der Atomhülle einen Dipol mit dem Moment $\vec{m} = B\vec{E}$, wobei B die experimentell und theoretisch ermittelbare Polarisierbarkeit des jeweiligen Atoms ist. Der induzierte Dipol wirkt seinerseits auf das Elektron mit der Kraft²⁸

$$\vec{K} = (\vec{m} \cdot \vec{r}) \vec{E} = +\beta \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) \frac{\vec{r}}{r^3} = - \frac{2\beta \vec{r}}{r^6}.$$

Somit besitzt das Elektron im Dipolfeld die potentielle Energie

$$V_p = - \int \frac{2\beta \vec{r}}{r^6} \cdot \frac{\vec{r}}{r} d\vec{r} = - \frac{\beta}{2r^4}. \quad (12)$$

Wie groß die Polarisierung in Atomnähe ist, läßt sich damit nicht sagen; klar ist lediglich, daß sie in Kernnähe verschwindet. Als zwischen 0 und $-\beta/2r^4$ interpolierende Funktion benützt man ^{29,30}

$$V_p(r) = - \frac{\beta}{2r^4} \left[1 - \exp\left(-\left(\frac{r}{R_0}\right)^8\right) \right]. \quad (13)$$

Dieses Potential steigt von $r=0$ steil zu seinem Maximum bei $r \approx 1.03 R_0$ an und fällt dann $\sim 1/r^4$ ab. Der Exponent 8 ist nicht wesentlich, er könnte auch modifiziert werden. Entscheidend ist hingegen der Parameter R_0 , welcher die Lage und die Höhe des Maximums von V_p festlegt: Je kleiner R_0 desto größer ist $(V_p)_{\max}$ und desto kleiner ist $(r)_{\max}$. Es ist naheliegend, für R_0 die Lage r_0 des letzten Maximums des Betrages der Wellenfunktion des äußersten Hüllenelektrons zu nehmen ²⁹. Allerdings hat Lenander im Rahmen einer Theorie zur Berechnung der Polarisierbarkeit β gezeigt ³⁰, daß diese r_0 -Werte, welche z.B. für Sauerstoff 0.9, Stickstoff 1.0 und Argon 1.3 betragen (siehe Zit. ²⁰ Abschn. 1321) viel zu klein sind, falls der Einfluß der Polarisierung allein berücksichtigt werden soll und gibt Werte von R_0 an, für O: 5.9; N: 6.75 und A: 4.5, also ein Vielfaches von r_0 .

2.4 Das statistische Austauschpotential V_{ex}

Wir berücksichtigen nun nachträglich den in 2.1 vernachlässigten Elektronenaustausch mit Hilfe der Hartree-Fock'schen Ein-
teilchen-Wellengleichungen. Das streuende Atom besitze n Hüllenelektronen, zu denen noch das mit i indizierte einfallende Elektron kommt. Die Wellengleichung dieses Elektrons im Felde des Atoms lautet dann ³¹

$$(H_i + V_o(\vec{r}) - E_i) \varphi_i(\vec{r}) = \frac{\varphi_i(\vec{r})}{\varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r})} \left[\sum_{j=1}^{n+1} \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \varphi_i^*(\vec{r}') \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}') d^3\tau' \right] \quad (14)$$

wobei H_i der Hamiltonoperator für die kinetische Energie des

Elektrons i und V_0 das Potential des Kernes und der übrigen n Elektronen ist

$$V_0(\vec{r}) = -\frac{Z}{r} + \sum_{j=1}^{n-1} \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}') d^3\vec{r}'$$

und nichts anderes als das effektive Potential V_a in (11) ist, wenn die φ_j den Grundzustand des Atoms beschreiben. Das Ziel ist es nun, den komplizierten Ausdruck des Summenterms in (14), welcher die unbekannte Wellenfunktion des gestreuten Elektrons i enthält und als Austauschenergie gedeutet werden kann, mit Hilfe statistischer Betrachtungen zu vereinfachen. Der Grundgedanke dabei ist, daß die Elektronen als ein entartetes Gas am absoluten Nullpunkt betrachtet werden ³². Das Gebiet der Hülle wird eingeteilt in kleine Phasenzellen $V \cdot P$, in denen sich aber immer noch viele Elektronen befinden sollen, und zwar jeweils gleichviele vom "spin up" und "spin down" Typ. Die Verbindung von Statistik und Quantenmechanik besteht darin, daß im Phasenvolumen h^3 höchstens 2 Elektronen sein können und Impuls- und Wellenvektor durch $\hbar \mathbf{k} = \vec{p}$ verknüpft sind. Die Elektronen im kleinen Volumen V werden als frei beweglich, d.h. feldfrei, angenommen mit der kinetischen Energie $p^2/2m$. Da die Energie nur vom Betrag des Impulses abhängt, sind die energetisch tiefsten Quantenzustände in einer Kugel des Impulsraumes vom Radius p_m enthalten, wenn p_m der maximal vorkommende Impuls ist. Es gilt

$$P \cdot V = \frac{4\pi}{3} p_m^3 V.$$

p_m läßt sich berechnen, wenn man bedenkt, daß die Anzahl N der möglichen Quantenzustände gegeben ist durch

$$N = PV / \frac{h^3}{2} = \frac{8\pi p_m^3 V}{3h^3}, \text{ so daß also}$$

$$p_m = \frac{h}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} = \frac{h}{2} \left(\frac{3}{\pi} \rho \right)^{1/3}, \quad (15)$$

wenn ρ die in der Zelle V als konstant angesehene Elektronendichte ist.

Nun zur Austauschenergie: Sie beträgt in erster störungstheoretischer Näherung für 2 Elektronen i, j mit parallelem Spin

$$A_{ij} = \int \varphi_i^*(\vec{r}') \varphi_j^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}') \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r} d^3\vec{r}'.$$

Da die Elektronen in V kräftefrei sein sollen, erhält man mit $\varphi_1(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}}$ und der Beziehung $\hbar \vec{k} = \vec{p}$ dafür

$$A_{ij} = \frac{h^2}{\pi V |\vec{p}_j - \vec{p}_i|^2}.$$

Ersetzt man in der Summe $A_i = \sum_{j \neq i} A_{ij}$ für die gesamte Austauschenergie des i -ten Elektrons mit den übrigen mit gleichem Spin die Summation durch eine Integration, d.h.

$$A_i = \frac{h^2}{\pi V} \int_0^{\vec{p}_m} \int_0^{\vec{p}_m} \frac{1}{p_j^2 + p_i^2 - 2p_i p_j \cos \vartheta} \frac{2\pi V}{h^3} \sin \vartheta d\vartheta p_j^2 dp_j,$$

so erhält man dafür

$$A_i = \frac{1}{h} \left[\frac{p_m^2 - p_i^2}{p_i} \ln \left(\frac{p_m + p_i}{p_m - p_i} \right) + 2p_m \right]. \quad (16)$$

Dabei ist zu beachten, daß der Selbstaustauschterm für $i=j$ bei der Integration nicht eliminiert werden konnte, so daß wir durch den Übergang von der Summation zur Integration für A_i sicher einen zu großen Wert erhalten. Mit der Austauschenergie (16) lautet jetzt (14)

$$(H_i + V_o(\vec{r}) - E_i) \varphi_i(\vec{r}) = \frac{A_i}{\varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r})} \varphi_i.$$

Wir mitteln nun $A_i / \varphi_i^* \varphi_i$ über alle möglichen Elektronen und ersetzen die Summation durch eine Integration, also

$$\frac{A_i}{\varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r})} \rightarrow \frac{\sum A_i \varphi_i^* \varphi_i}{\sum \varphi_i^* \varphi_i} \rightarrow \frac{\int A_i dn}{\int dn} =: W \quad (17)$$

mit $dn = \frac{4\pi p_i^2 V}{h^3} dp_i$ als Anzahl der Elektronen pro Impulsintervall dp_i . Man erhält so das Slaterpotential

$$W_S = \frac{3}{h} p_m. \quad (18)$$

Nimmt man hingegen an, daß in (16) alle Impulse den Maximalwert p_m erreichen, so erhält man das Diracpotential

$$W_D = \frac{2}{h} p_m. \quad (19)$$

Dasselbe Potential erhält Gaspar auf andere Weise³³ und unter näherungsweise Subtraktion des Selbstaustausches, welchen wir beim Übergang von der Summation zur Integration nicht eliminie-

ren konnten. Deshalb ist W_S sicher zu groß und W_D ist wohl geeigneter den Austausch zu beschreiben.

Jetzt erfolgt der Übergang von der kleinen Zelle V , in der die Dichte ρ als konstant betrachtet wurde, zum gesamten Atomgebiet: Die Zelle V schrumpft dabei auf den Punkt $\vec{r}$ zusammen, und die Elektronendichte ρ in (15) wird gegeben durch das Atompotential $V_a(r)$ der übrigen n Elektronen

$\rho = -\frac{1}{4\pi} \Delta V_a$, so daß man aus (18) und (19) die radialsymmetrischen Austauschpotentiale

$$W_D = \left[\frac{3}{4\pi^2} \Delta V_a(r) \right]^{1/3} =: V_{ex}(r) \quad (20)$$

$W_S = 1.5 W_D$
erhält.

2.5 Die Partialwellenmethode für die Diracgleichung.

Aufgrund des in der Einleitung über nichtrelativistische und relativistische Rechnungen Gesagten verwenden wir in (9) für H_e den Diracoperator, so daß wir für irgendeine Kombination V der radialsymmetrischen Potentiale V_a, V_p und V_{ex} die Diracgleichung in der Form

$$\begin{aligned} [(W+V)\alpha + 1/\alpha] \chi + \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \phi &= 0 \\ [(W+V)\alpha - 1/\alpha] \phi + \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \chi &= 0 \end{aligned} \quad (21)$$

zu lösen haben, wobei

$$\chi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \phi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \quad \vec{p} = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$$

und $\vec{\sigma}_i$ die Paulimatrizen sind. Löst man (21) nach χ auf, so erhält man

$$\chi = \frac{-\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{(W+V)\alpha + 1/\alpha} \phi, \quad (22)$$

$$[(W+V)\alpha - 1/\alpha] \phi - \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \frac{1}{(W+V)\alpha + 1/\alpha} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \phi = 0.$$

Für die Amplituden ψ_{in}, ψ_{out} des einfallenden bzw. gestreuten

Es wird ab hier $V' = -V \geq 0$ für alle auftretenden Potentiale gesetzt und dann der Strich wieder weggelassen.

Elektrons ist $V=0$. Damit und mit (22), sowie $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \vec{p}^2$ erhält man für das Verhältnis von ein- und ausfallenden Elektronen

$$\frac{\psi_{out}^* \psi_{out}}{\psi_{in}^* \psi_{in}} = \frac{\chi_{out}^* \chi_{out} + \phi_{out}^* \phi_{out}}{\chi_{in}^* \chi_{in} + \phi_{in}^* \phi_{in}} = \frac{\phi_{out}^* \left[1 + \frac{\vec{p}^2}{(W\alpha + 1/\alpha)^2} \right] \phi_{out}}{\phi_{in}^* \left[1 + \frac{\vec{p}^2}{(W\alpha + 1/\alpha)^2} \right] \phi_{in}}$$

Bei elastischer Streuung ist aber der Betrag des Impulses eine Erhaltungsgröße, so daß $\vec{p}^2 \phi_{out} = \langle \vec{p}^2 \rangle \phi_{out}$, $\vec{p}^2 \phi_{in} = \langle \vec{p}^2 \rangle \phi_{in}$ und damit

$$\frac{\psi_{out}^* \psi_{out}}{\psi_{in}^* \psi_{in}} = \frac{\phi_{out}^* \phi_{out}}{\phi_{in}^* \phi_{in}},$$

so daß also nur die beiden letzten Komponenten ψ_3, ψ_4 des Diracspinors berechnet werden müssen.

Mit Hilfe der Partialwellenmethode sind die Streuamplituden nach Mott² bestimmt durch Lösen des homogenen Differentialgleichungssystems 1. Ordnung

$$\begin{aligned} [(W+V)\alpha + 1/\alpha] F_j(r) + \frac{dG_j(r)}{dr} + \frac{-j}{r} G_j(r) &= 0 \\ -[(W+V)\alpha - 1/\alpha] G_j(r) + \frac{dF_j(r)}{dr} + \frac{2+j}{r} F_j(r) &= 0 \end{aligned} \quad (23)$$

mit $j=1$ für "spin up" und $j=-1$ für "spin down" Elektronen. Die Streuphasen δ_j erhält man, indem man die Gleichung (23) bis zu dem Radius a integriert, für den das Potential verschwindet bzw. praktisch 0 wird, und dann diese Lösungen $G_j(a)$ und $F_j(a)$ an die Lösung des freien Elektrons mit dem Impuls k

$$G_j(r) = j_1(kr) \cos \delta_j - n_1(kr) \sin \delta_j$$

$$F_j(r) = (-G_j'(r) + \frac{j}{r} G_j(r)) / (W\alpha + 1/\alpha)$$

stetig anschließt. Dies gibt die Gleichungen

$$G_j(a) = j_1(ka) \cos \delta_j - n_1(ka) \sin \delta_j \quad (24)$$

$$F_j(a) = [-j_1'(ka) \cos \delta_j + n_1'(ka) \sin \delta_j + \quad (25)$$

$$\frac{j}{r} (j_1(ka) \cos \delta_j - n_1(ka) \sin \delta_j)] / (W\alpha + 1/\alpha)$$

Dividiert man (24) und (25) durch $\cos \sigma_j$ und bildet dann den Quotienten $F_j(a)/G_j(a)$ und löst diese Gleichungen mit Hilfe der Rekursionsformeln für die Ableitungen der Bessel-bzw. Neumann-funktionen

$$x \frac{d}{dx} j_1 = -x j_{1+1} + 1 j_1, \quad x \frac{d}{dx} n_1 = -x n_{1+1} + 1 n_1$$

nach $\tan \sigma_j$ auf, so erhält man schließlich für die Phasen

$$(26)$$

$$\tan \sigma_j = \frac{k j_{1+1}(ka) - j_1(ka) [(W\alpha + 1/\alpha) F_j(a)/G_j(a) + (1-j)/a]}{k n_{1+1}(ka) - n_1(ka) [(W\alpha + 1/\alpha) F_j(a)/G_j(a) + (1-j)/a]}$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt I und die Spinpolarisation P als Funktion des Streuwinkels θ sind dann gegeben durch

$$I(\theta) = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2, \quad P(\theta) = \frac{i(fg^* - f^*g)}{I(\theta)}, \quad (27)$$

wobei man die Amplituden g und f durch Aufsummieren der unendlichen Reihen

$$f(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} [(l+1)(1 - e^{2i\sigma_l}) + l(1 - e^{2i\sigma_{-l-1}})] P_l(\cos \theta)$$

$$(28)$$

$$g(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} [e^{2i\sigma_l} - e^{2i\sigma_{-l-1}}] P_l^1(\cos \theta)$$

erhält.

3. Numerische Behandlung.

Die numerische Auswertung der in Kap.2 entwickelten Theorie kann nur mit Hilfe einer elektronischen Rechenmaschine geschehen. Es wurden zwei Algolprogramme aufgestellt, eines für analytisch und eines für numerisch gegebene Potentiale. Das Hauptproblem zur Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnitts und der Spinpolarisation ist die Lösung der Differentialgleichungen (23).

3.1 Differentialgleichung zur Berechnung der Phasen.

Es hat sich bei früheren Rechnungen ^{5,34} und auch hier gezeigt, daß, um eine möglichst empfindliche und genaue Lösung der Differentialgleichungen zu erhalten, es besser ist, nicht von (23) auszugehen, sondern in (23) die Transformation

$$G_j(r) = A_j(r) \frac{\cos \phi_j(r)}{r}, \quad F_j(r) = \frac{\sin \phi_j(r)}{r} \quad (29)$$

durchzuführen, welche das System (23) überführt in

$$\frac{d\phi_j}{dr} = \frac{-j-1}{r} \sin 2\phi_j(r) + \alpha(W+V(r)) - \frac{1}{\alpha} \cos 2\phi_j(r) \quad (30)$$

$$\frac{1}{A_j(r)} \frac{dA_j(r)}{dr} = \frac{j+1}{r} \cos 2\phi_j(r) - \frac{1}{\alpha} \sin 2\phi_j(r). \quad (31)$$

Aus (29) ist ersichtlich, daß man dann die Streuphasen ϕ_j erhält, indem man in (26) $F_j(a)/G_j(a)$ durch $\tan \phi_j(a)$ ersetzt. Es ist also unsere Aufgabe die inhomogene Differentialgleichung 1. Ordnung (30) für alle Drehimpulse l zu integrieren. Die Phasen und damit $I(\theta)$ und $P(\theta)$ sind dann sofort berechenbar unter Benützung der Rekursionsformeln für die Bessel- und Neumannfunktionen

$$j_0(x) = (\sin x)/x, \quad n_0(x) = -(\cos x)/x$$

$$j_1(x) = j_0(x)/x + n_0(x), \quad n_1(x) = n_0(x)/x - j_0(x)$$

$$j_{l+1}(x) = (2l+1)j_l(x)/x - j_{l-1}(x)$$

$$n_{l+1}(x) = (2l+1)n_l(x)/x - n_{l-1}(x).$$

Um die Integration von (30) beginnen zu können, muß zunächst noch der Anfangswert von ϕ_j berechnet werden und das Potential

$V(r)$ in eine der Rechenmaschine angepaßte Form gebracht werden.

3.1.1 Anfangswertbestimmung.

Der Beginn der Integration von (30) liegt bei sehr kleinen r -Werten, etwa in der Größenordnung von $b=10^{-3}$. Sie könnte theoretisch auch bei $r=0$ beginnen, was aber die verwendete Integrationsprozedur wegen des Nenners in (30) nicht erlaubt. Den Autoren von Zit.⁵ folgend, entwickeln wir das Potential $V(r)$ und die Lösungen $\phi_j(r)$ in diesem Bereich in

$$V(r) = \frac{1}{r}(Z_0 + Z_1 r + Z_2 r^2 + Z_3 r^3), \quad (32)$$

$$\phi_j(r) = \phi_j^0 + \phi_j^1 r + \phi_j^2 r^2 + \phi_j^3 r^3,$$

was, eingesetzt in (30) die Koeffizienten ϕ_j^i liefert:

$$\sin 2\phi_j^0 = Z_0 \alpha / (j+1)$$

$$\phi_j^1 = \frac{W \alpha^2 + Z_1 \alpha^2 - \cos 2\phi_j^0}{(1+2(j+1)\cos 2\phi_j^0)} \quad (33)$$

$$\phi_j^2 = \frac{2\phi_j^1 \sin 2\phi_j^0 (1/\alpha + (j+1)\phi_j^1) + Z_2 \alpha}{2+2(j+1)\cos 2\phi_j^0}$$

$$\phi_j^3 = \left[2\phi_j^2 \sin 2\phi_j^0 (1/\alpha + 2(j+1)\phi_j^1) + 2(\phi_j^1)^2 \cos 2\phi_j^0 \right. \\ \left. (1/\alpha + 2(j+1)\phi_j^1/3) + Z_3 \alpha \right] / (3+2(j+1)\cos 2\phi_j^0).$$

Mit diesem Anfangswert für $\phi_j(b)$ kann die Integration begonnen werden.

3.1.2 Behandlung der Potentiale.

Die Atompotentiale von Clementi und Libermann et al. sind von Cox und Bonham³⁵ mit der Methode der kleinsten Quadrate durch analytische Ausdrücke der Form

$$V_a(r) = \frac{Z}{r} \sum_{i=1}^s g_i e^{-\lambda_i r}$$

approximiert worden, welche ohne weitere Behandlung in (30) benutzt werden können. Die Zahl s der Summanden nimmt mit wachsender Ordnungszahl zu und reicht von $s=3$ bei Ne bis $s=10$ bei Xe. Die Potentiale von Froese und Mayers sind numerisch gegeben. Zur Interpolation der an den Stellen r_k gegebenen effektiven

Kernladungszahlen $Z_k = V_k r_k$ wurde der "spline-fit" verwendet, welcher mit Polynomen 3. Grades interpoliert mit der Gewähr der Stetigkeit der 1. und 2. Ableitung. Dies ist nötig, um bei der Berechnung von V_{ex} gemäß (20) einen stetigen Potentialverlauf zu haben. Es sei hier eine Skizze des "spline-fit" gegeben ³⁶: Die an den Stellen r_k gegebenen Kernladungszahlen Z_k werden interpoliert durch die Polynome ($k = 1, \dots, n$)

$$Z_k(r) = \frac{M_{k-1}(r_k - r)^3}{6l_k} + \frac{M_k(r - r_{k-1})^3}{6l_k} + \left(\frac{Z_k}{l_k} - \frac{M_k l_k}{6} \right) (r - r_{k-1}) + \left(\frac{Z_{k-1}}{l_k} - \frac{M_{k-1} l_k}{6} \right) (r_k - r),$$

wobei $l_k = r_k - r_{k-1}$ ist und $r_{k-1} \leq r \leq r_k$. Die n Koeffizienten M_k , welche nichts anderes als die 2. Ableitungen von $Z_k(r)$ in den Punkten r_k sind, werden erhalten durch Lösen des linearen Gleichungssystems für die M_k

$$\frac{1}{6} M_{k-1} + \frac{1}{3} M_k + \frac{1}{6} M_{k+1} = \frac{Z_{k+1} - Z_k}{l_{k+1}} - \frac{Z_k - Z_{k-1}}{l_k}, \quad k=2, \dots, n-1$$

Dieses System bestimmt die M_k eindeutig, falls man 2 Zusatzbedingungen an sie stellt. Für einen Potentialverlauf, wie er bei uns gegeben ist, ist es angebracht

$$M_1 = \lambda_1 M_2, \quad M_n = \lambda_n M_{n-1}$$

zu setzen. Da sich bei Testrechnungen bei Variation von λ_1, λ_n die Phasen praktisch nicht änderten, wurde stets $\lambda_1 = \lambda_n = 1$ gesetzt, was einem parapolischen Verlauf der Kurven $Z_k(r)$ bei r_1 und r_n entspricht. Das Froese-Potential, bei dem die Stützstellen r_k sehr eng beieinander liegen, wurde nur in jedem 2. Punkt interpoliert, wobei durch Testrechnungen gesichert wurde, daß diese Interpolation genau genug war.

Für die Anfangswertbestimmung in 3.1.1 wurden die Potentiale $V(r)$ in ein Polynom 3. Grades entwickelt (32). Bei den analytischen Potentialen geschah dies durch Entwickeln der Exponentialfunktion, bei den durch "spline" interpolierten waren die Koeffizienten $Z_0 - Z_3$ ohnehin gegeben. V_p kann für kleine r entwickelt werden in

$$\frac{B}{2} \left(- \frac{r^4}{(R_0)^8} + \dots \right).$$

Da bei der Anfangswertbestimmung nur Glieder einschließlich der Ordnung $\frac{1}{r}Z_3r^3$ berücksichtigt werden, fällt V_p außer betracht. Das statistische Austauschpotential V_{ex} wird hingegen berücksichtigt durch

$$V_{ex}(r) = (3/2\pi^2)^{1/3} (Z_2/r + 3Z_3)^{1/3} = (3/2\pi^2)^{1/3} \frac{1}{r} (Z_2r^2 + 3Z_3r^3)^{1/3}$$

so daß in guter Näherung zu dem Z_0 des V_a noch

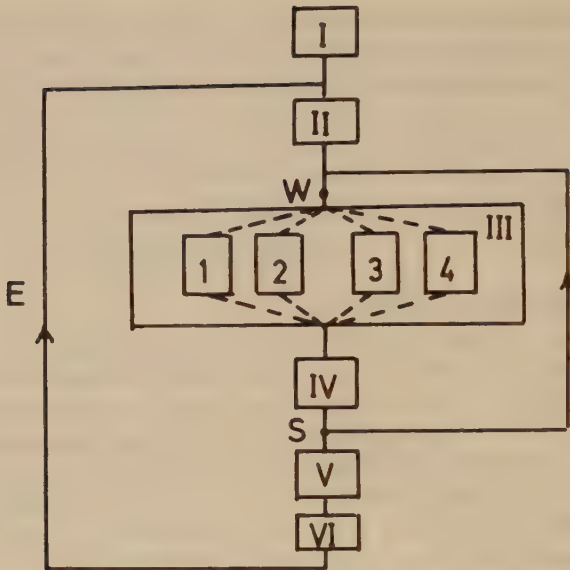
$$(3/2\pi^2)^{1/3} (Z_2b^2 + 3Z_3b^3)^{1/3} \text{ hinzuaddiert wird.}$$

3.1.3 Das Integrationsverfahren.

Die numerische Integration der Differentialgleichung (30) für die verschiedenen l erfolgte mit Hilfe einer Rechenprozedur von Bulirsch und Stoer³⁷ mit automatischer Schrittweitenbestimmung, falls der 1. Schritt angegeben wird. Bei numerisch gegebenen und durch Polynome 3. Grades interpolierten Potentialen wurden dabei die Interpolationsstützpunkte angelaufen, um keine Unstetigkeiten in der 5. Ableitungen benutzenden Prozedur zu überspringen. Der Integrationsradius a wurde bei Verwendung von ins Unendliche reichenden Potentialen, wie V_p und $\frac{Z}{r} \sum_i g_i \exp(-\lambda_i r)$, durch Testrechnungen so festgelegt, daß sich die Phasen σ_j innerhalb der vorgegebenen Genauigkeitsschranke von 10^{-3} nicht mehr änderten. Bei den numerisch vorgegebenen Potentialen wurde die Integration bis zum letzten vorliegenden Potentialwert durchgeführt. Die Anzahl der berechneten Phasen wurde so bestimmt, daß bei einem $|\sigma_j| \approx 10^{-3}$ abgebrochen wurde. Die σ_{-1-1} -Phasen wurden von den σ_l -Phasen soweit getrennt berechnet bis $|\sigma_l - \sigma_{-1-1}| < 10^{-3}$ war.

3.2 Die Algolprogramme.

Es wurden zwei Algolprogramme für die Rechenmaschine TR4 am Leibniz-Rechenzentrum München geschrieben mit folgendem schematischen Aufbau



In I wurde das Potential interpoliert bzw. die Koeffizienten des analytisch gegebenen Potentials in passende Form gebracht. II-IV werden für jede Energie der Elektronen durchlaufen: Energieschleife E. In II werden die Anfangswerte zur Integration der Differentialgleichungen berechnet. In der Weiche W wird entschieden, in welchen der Unterblöcke 1-4, in denen die Gleichung (30) integriert wird, gesprungen wird, und zwar je nachdem ob mit $V = V_a + V_p(1)$, $V = V_a + V_{ex}(2)$, $V = V_a + V_p + V_{ex}(3)$ oder $V = V_a(4)$ gerechnet wird. In IV werden die Phasen δ_1, δ_{-1-1} berechnet. Im Schalter S wird entschieden ob δ_{-1-1} weiter getrennt ermittelt wird. Wenn dies nicht mehr der Fall sein sollte, wird ab jetzt $\delta_1 = \delta_{-1-1}$ gesetzt und nur mehr δ_1 berechnet. Nachdem in IV alle Phasen ermittelt sind, werden in V alle Streuwerte berechnet und in VI eventuell noch ein Programm für den Graphomaten geschrieben. Die Rechenzeit pro Phase δ_1 betrug im Durchschnitt etwa 100sec.

4. Resultate für die Streuung an Ne, A, Kr, Xe und Hg.

In den Figuren 1-28 sind die wichtigsten Ergebnisse des differentiellen Wirkungsquerschnitts $I(\theta)$ und der Spinpolarisation $P(\theta)$ im Vergleich mit den Experimenten gezeichnet. Da es keine Absolutmessungen von $I(\theta)$ gibt, sind die theoretischen und experimentellen Kurven wie üblich in einem Punkt so angepaßt, daß sie möglichst gut übereinstimmen. Das Auflösungsvermögen des Detektors ist bei den theoretisch ermittelten Kurven nicht berücksichtigt.

4.1 Rechnungen ohne Parametervariation.

Zunächst werden die Zusatzpotentiale V_p und V_{ex} für Polarisierung und Austausch zusätzlich zu dem Atompotential V_a verwendet in der Form wie sie in 2.3 und 2.4 in den Gleichungen (13) und (20) abgeleitet wurden.

4.1.1 Rechnungen mit $V_a + V_p$.

Es zeigte sich, daß sich die Ergebnisse, erhalten aus Rechnungen mit Werten von R_0 in V_p , wie sie Lenander angibt³⁰, also für Argon $R_0 = 4.5$ (für die anderen Atome wurden sie gemäß den großen Werten für O und N, siehe 2.3, entsprechend hoch angenommen), praktisch nicht von den Rechnungen mit V_a allein unterschieden; dies bedeutet, daß die Polarisierung der Atomhülle bei den von uns untersuchten Elementen und in unserem Energiebereich nahezu keinen Einfluß auf die Streuung hat.

4.1.2 Rechnungen mit $V_a + V_p + V_{ex}$.

Die Ergebnisse unter Berücksichtigung des Potentials für den statistisch gemittelten Austausch V_{ex} (20), also dem Gesamtpotential $V = V_a + V_p + V_{ex}$, was nach dem in 4.1.1 Gesagten gleichbedeutend mit $V = V_a + V_{ex}$ ist, zeigen bei allen Elementen, Ne (Fig. 2), A (Fig. 1), Kr (Fig. 2), Xe (Fig. 16) und Hg (Fig. 3) die gleiche Tendenz. Der differentielle Wirkungsquerschnitt $I(\theta)$ zeigt eine zu starke Struktur gegenüber dem Experiment. Ebenso ist diese Strukturzunahme gegenüber den Rechnungen mit V_a allein festzustellen. Je nachdem nun das Experiment eine stärkere oder schwächere Struktur in $I(\theta)$ aufweist desto besser oder schlechter stimmen die Resultate, berechnet mit $V = V_a + V_p + V_{ex}$, mit jenen überein: Bei

Ne, A, Kr besser, bei Xe, Hg schlecht. Der Grund dafür, daß V_{ex} nicht gut geeignet ist, Übereinstimmung von Theorie und Experiment zu erzielen, liegt natürlich in der groben statistischen Behandlung des Austauschs und wohl auch in der Tatsache, daß der Selbstaus-tausch nicht befriedigend eliminiert werden konnte. Letzteres wird bekräftigt durch Rechnungen mit dem Slater'schen Austausch-potential, welches 1.5 mal so groß wie V_{ex} ist, und noch eine stär-kere Struktur in $I(\theta)$ brachte. Daß die Übereinstimmung der Spin-polarisation $P(\theta)$ bei Hg (Fig. 4) mit dem Experiment relativ gut ist, überrascht, wenn man die Ergebnisse des Wirkungsquerschnitts betrachtet. Da es aber das Ziel ist, beide, $P(\theta)$ und $I(\theta)$, möglichst gut im Vergleich zum Experiment zu berechnen, scheidet das Poten-tial V_{ex} zunächst aus. Daran ändert auch die bessere Übereinstim-mung bei höheren Energien nichts (Fig. 9, 11), da hier bereits al-lein unter Verwendung von $V = V_a$ gute Ergebnisse erzielt werden. V_{ex} ist bei hohen Energien nicht mehr sehr wirksam, d.h. der Aus-tausch hat keinen großen Einfluß mehr.

4.2 Rechnungen mit Parametervariation.

Da die Übereinstimmung von Theorie und Experiment mit Hilfe der Zusatzpotentiale V_p und V_{ex} nicht befriedigend ist, ist es nahe-liegend, ähnlich wie in der Kernphysik, diese Potentiale mit vari-ierbaren Parametern auszustatten. V_{ex} scheidet dabei aus, da ein Parameter, sinnvollerweise einfach als Faktor $F \cdot V_{ex}$, die Resultate für Hg nicht verbessern würde, da $F \cdot V_{ex}$ in jedem Fall zu stark wirkt (Fig. 3). Überdies - ein sehr triftiger Grund - gestattet die Beschränkung der Rechenzeit an der Maschine keine große An-zahl von Parametern.

Hingegen liegt es nahe, das Polarisierungspotential in der Form (13), welches offenbar überhaupt keine Wirkung zeigt (siehe 4.1.1), abzuändern. Es bietet sich sofort die ursprüngliche Definition des Abschnneideradius R_0 in 2.3, nämlich $R_0 = r_0$, an. In der Absicht, die theoretischen Resultate an das Experiment anzupassen, füh-ren wir noch die Variable f ein, so daß

$$V_p(f) := \frac{\beta}{2r^4} \left[1 - \exp \left(-(r/r_0 f)^8 \right) \right] \quad (35)$$

unser neues "Polarisierungspotential" wird.

4.2.1 Rechnungen mit $V_a + V_{ex} + V_p(f)$.

Wie immer auch der Parameter f variiert wurde, ergaben die Rechnungen keine Verbesserung der Resultate im Vergleich zum Experiment. Zwei Beispiele mit optimaler Wahl von f sind in den Fig. 3, 4 gegeben. Es seien an dieser Stelle die Werte für β und r_0 , wie man sie in der Literatur findet, wiedergegeben:

	Ne	A	Kr	Xe	Hg
β	a 2.65	a 11	b 16.8	b 27	b 34.5
r_0	c 0.65	c 1.3	d 1.7	d 2.0	e 2.45

a Zit.³⁰, b Zit.²⁰ Seite 401, c Zit.²⁰ Abschn. 1321, e Zit.²⁴,
d hier lagen keine Werte vor; obige, von uns getroffene Wahl, ist nicht von Bedeutung, da der Parameter f sowieso variiert wird.

4.2.2 Rechnungen mit $V_a + V_p(f)$.

Aus den Figuren 1, 7, 8, 11 für A, 12-14 für Kr und 18-23 für Hg sehen wir, daß $I(\theta)$ und insbesondere $P(\theta)$, berechnet mit $V = V_a + V_p(f)$, wesentlich besser mit dem Experiment übereinstimmen als die Resultate, berechnet mit $V = V_a$ allein. Bei einer Energie von ca. 40 eV ist $V_p(f)$ nicht mehr sehr wirksam (Fig. 9, 24, 25), lediglich bei A 40 eV konnte eine Verbesserung in $P(\theta)$ erzielt werden (Fig. 11). Da die Experimente für Hg mit einer Energieunsicherheit von ± 1 eV angegeben sind, wurden als Test auch Rechnungen bei 6, 7 und 8 eV durchgeführt. Es zeigte sich, daß sich über einen so kleinen Energiebereich $P(\theta)$ und $I(\theta)$ kaum ändern (Fig. 26, 27). In den Fig. 10, 15 sind die Polarisierungen für A und Kr bei verschiedenen Energien gezeichnet und zwar für den jeweiligen f -Wert, welcher die beste Übereinstimmung von Theorie und Experiment in $I(\theta)$ ergab. Experimente für $P(\theta)$ liegen in diesem Energiebereich bei den Edelgasen nicht vor. Die Energieabhängigkeit des Parameters $f(E)$ kann wiedergegeben werden durch eine einfache Funktion der Energie E [eV]

$$f(E) = f_0 + (1 - f_0)(E/E_0)^n,$$

welche man durch Interpolation der, für die Übereinstimmung Experiment-Theorie, günstigsten f -Werte erhält, und zwar für

$$\begin{aligned}\text{Argon:} \quad f(E) &= 0.97 + 0.03 (E/5)^2 \\ \text{Krypton:} \quad f(E) &= 0.88 + 0.1 (E/12)^2 \\ \text{Quecksilber:} f(E) &= 0.95 + 0.05 (E/23)^4\end{aligned}\quad (36)$$

Will man die Streuung für eine bestimmte Energie E berechnen, so ist der aufgrund von (36) erhaltene f -Wert sicher eine gute Näherung.

4.2.3 Rechnungen mit $V_p(f, \beta)$.

Da sich bei Neon und Xenon bei Variation von f keine entscheidende Verbesserung der Übereinstimmung von Theorie und Experiment ergab, lag es nahe, auch den an und für sich festen Wert von β zu variieren. Bei einem $\beta = 1.8$ und $f = 1.5$ konnte schließlich bei Ne 5 eV das beste Resultat erzielt werden, die Lage des Minimums von $I(\theta)$ bei 120° konnte so erreicht werden (Fig. 5). Eine befriedigende Übereinstimmung, insbesondere bei kleinen Winkeln, ist aber ausgeblieben. Man mag dies der niedrigen Ordnungszahl ($Z=10$) von Neon zuschreiben, da bei geringer Elektronenzahl eine Beschreibung des Atomzustands durch pauschale Potentiale wohl schlechter möglich ist als bei hohem Z . Für Xenon, bei dem auch die Variation von β keinen Erfolg brachte, versagt allerdings diese Erklärung. In den Fign. 6, 17 sind noch Kurven $I(\theta)$, berechnet mit V_a allein, für einige Energien angegeben.

Wie läßt sich nun die Variation der Parameter f und β physikalisch deuten?

4.3 $V_p(f, \beta)$ als Austauschpotential.

Klein und Brueckner behaupten, daß $V_p(f)$ in (35) neben der Polarisierung auch den Elektronenaustausch repräsentiere, falls f nur genügend klein gewählt werde³⁸. Dies wird etwas plausibel, wenn man das Potential von Biermann³⁹ betrachtet, welches Austausch und Polarisierung berücksichtigt und durch

$$V_B = V_a(1 + g(r) \exp -(r/r_0)^5) + \frac{B}{2r^4} (1 - \exp -(r/r_0)^5)$$

gegeben ist, wobei V_a das Atompotential und $g(r)$ ein noch radialabhängiger Parameter ist, welcher den Austausch simulieren soll. Unser Potential $V_p(f)$ versucht also, beide Terme in V_B zusammenzufassen.

Ein weiteres Argument dafür, daß $V_p(f)$ den Austausch enthält, sind die Rechnungen mit V_{ex} , welche ja tatsächlich den Elektronenaustausch berücksichtigen, und Kurven ähnlicher Form wie die Resultate mit $V_p(f)$ liefern (vgl. Fig. 1; 4 mit 19; 2 mit 12; 11). Eine noch bessere Bestätigung, daß $V_p(f)$ den Austausch simuliert und darüber hinaus dies der entscheidende Effekt bei der niederenergetischen Streuung ist, geben die Rechnungen von Walker⁴⁰, der bei Hg den Austausch allein mit Hilfe der Hartree-Fock'schen Methode berücksichtigte und sehr ähnliche Ergebnisse wie wir erhielt. Ein Beispiel ist in Fig. 28 gegeben. Daß unsere Rechnung den Experimenten noch etwas näher kommt, liegt an der Möglichkeit der Parametervariation, was bei der Hartree-Fock Rechnung nicht möglich ist.

Als Beispiel für die Änderung in den Phasen, berechnet mit $V=V_a$, $V=V_a+V_{ex}$, $V=V_a+V_p(f)$ geben wir in einer Tabelle die Werte für die Streuung an Kr bei 5 eV:

	$V=V_a$		$V=V_a+V_{ex}$		$V=V_a+V_p(f=0.9)$	
1	δ_1	δ_{-1-1}	δ_1	δ_{-1-1}	δ_1	δ_{-1-1}
0	-1.512		-0.272		-0.896	
1	1.273	1.396	0.098	0.146	-0.370	-0.342
2	0.034	0.048	1.334	1.343	0.404	0.411
3	0.003	0.003	0.182	0.182	0.069	0.069
4			0.028	0.028	0.027	0.027
5			0.003	0.003	0.014	0.014
6					0.008	0.008
7					0.004	0.004

Man kann aus der Tabelle drei Tatsachen, welche für alle durchgeführten Rechnungen charakteristisch sind, entnehmen:

1. Der Unterschied der δ_1 -zu den δ_{-1-1} -Phasen ist bei allen 3 Potentialen etwa in der gleichen Größenordnung, d.h. die Polarisierung $P(\theta)$ wird durch Berücksichtigung von Austausch und Polarisierung nicht größer, was verständlich ist, da der Hauptanteil der auf den Spin wirkenden Kraft vom starken Coulombfeld im Inneren des Atoms herrührt.

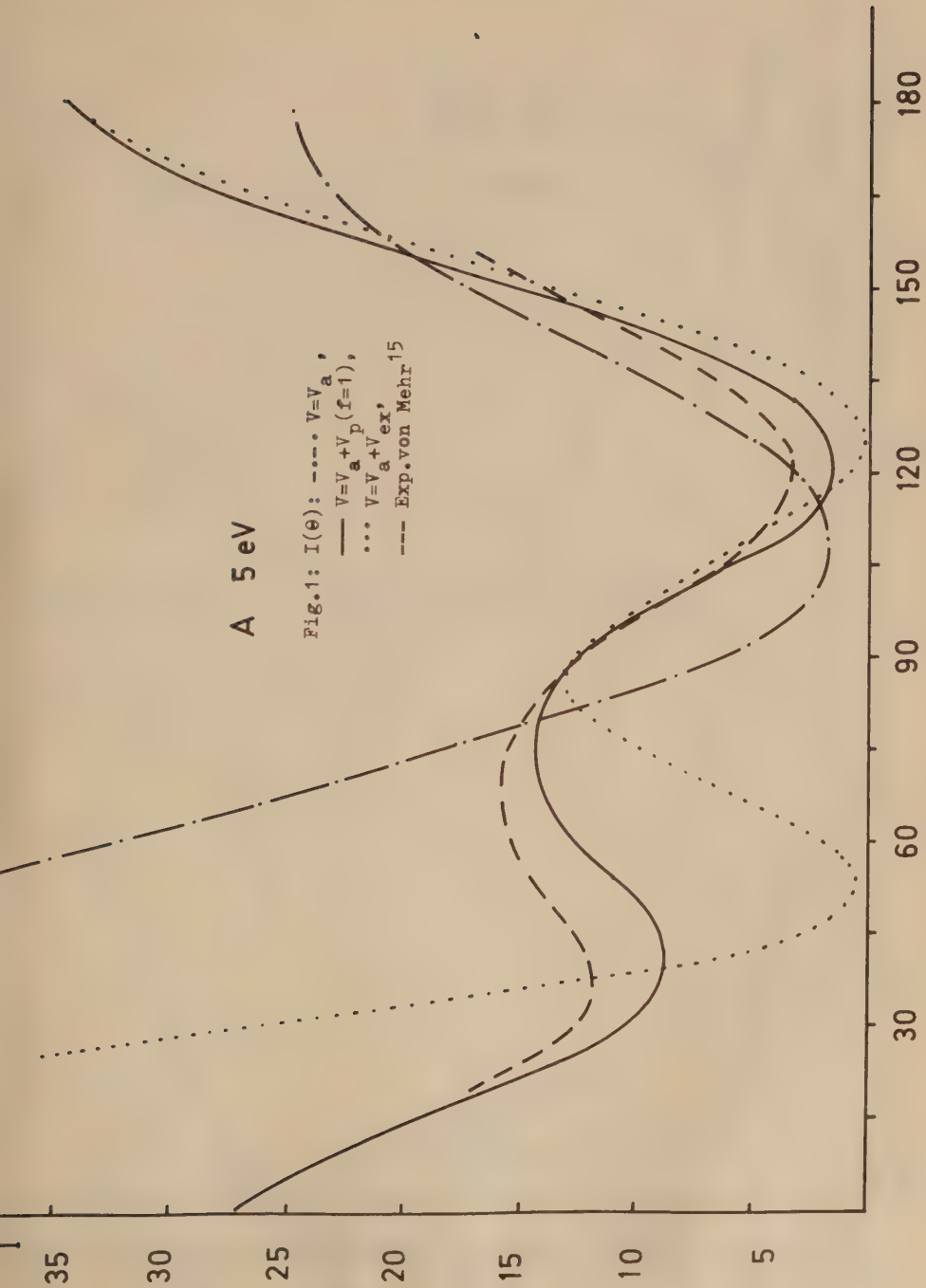
2. Die Phasen für kleine l unterscheiden sich verhältnismäßig stark bei den einzelnen Potentialen, was aus der Tatsache resultiert, daß die Zusatzpotentiale doch weit nach innen reichen und

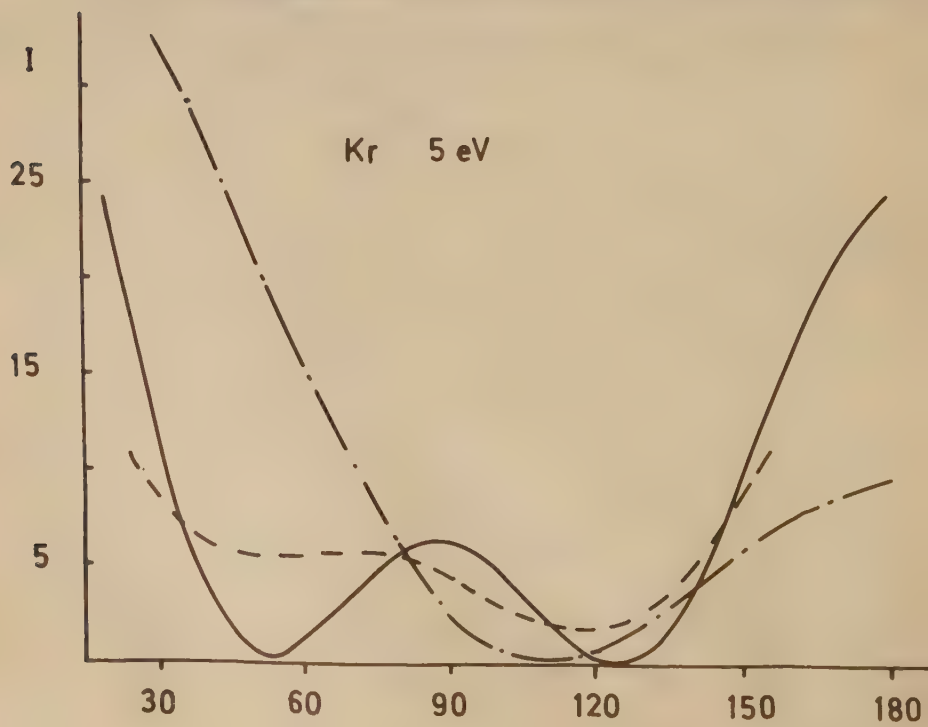
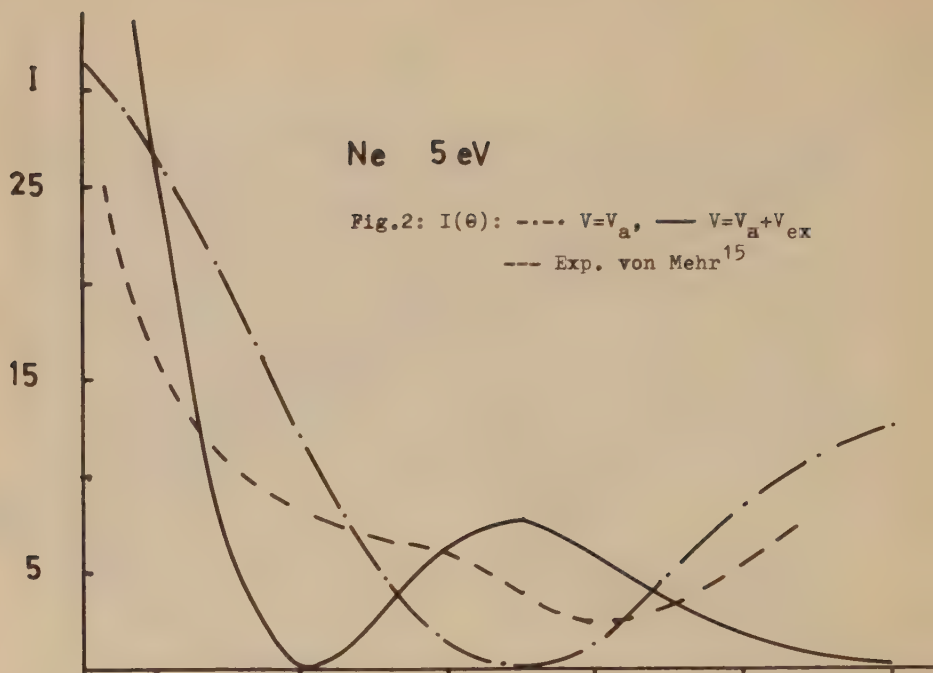
dort die Phasen geringer Ordnung besonders beeinflusst werden.

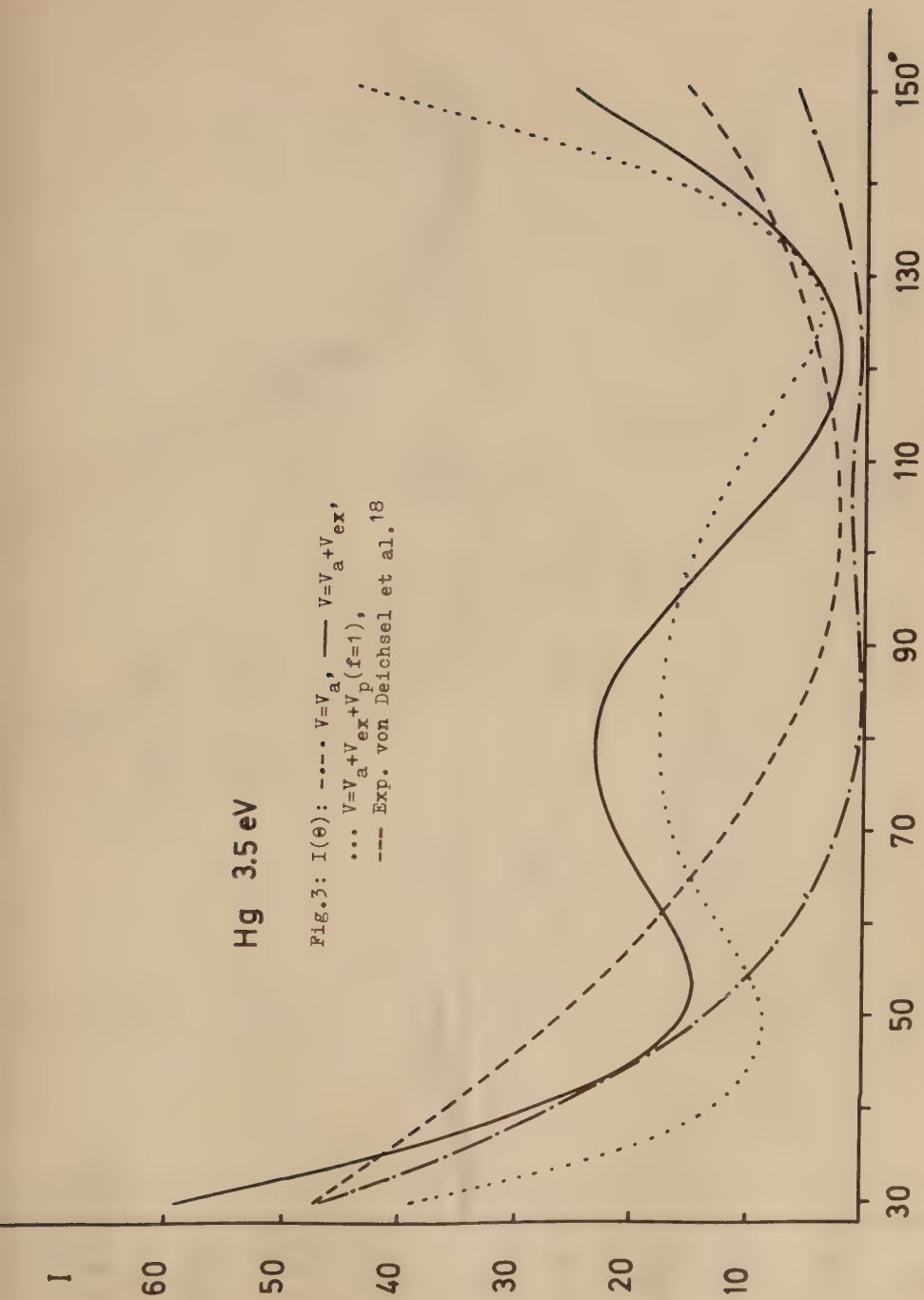
3. Vergleicht man die Phasen, berechnet mit V_a bzw. $V_a + V_{ex}$, mit denen, erhalten mit $V_a + V_p(f)$, so sieht man, daß die Phasen bei $V_a + V_p(f)$ für höhere l noch wesentlich größer sind. Dies ist erklärbar durch das weitreichende Dipolpotential $V_p \sim 1/r^4$, welches die Elektronen mit großem Drehimpuls beeinflusst.

Die Abhängigkeit des Potentials $V_p(f)$ von der Einschußenergie der Elektronen, wiedergegeben durch (36), besagt, daß mit zunehmender Energie $V_p(f)$ abgeschaltet werden muß um Übereinstimmung von Theorie und Experiment zu erreichen. Dies bedeutet also nach dem oben Gesagten, daß der Austausch einfluß mit wachsender Energie abnimmt. Dies ist plausibel, wenn man annimmt, daß die Austauschwahrscheinlichkeit mit zunehmender Verweilzeit des Elektrons im Atombereich steigt.

Zusammenfassend läßt sich aufgrund unserer Rechnungen sagen, daß das Potential $V_p(f)$ zusammen mit dem Atompotential V_a gut geeignet ist Übereinstimmung der theoretischen Resultate mit den experimentellen bei niederen Energien für die Elemente A, Kr und Hg zu erzielen, und daß ferner in diesem Energiebereich von 3-50 eV der Elektronenaustausch der maßgebliche Effekt ist, während die Atomhüllenpolarisierung geringen Einfluß hat.

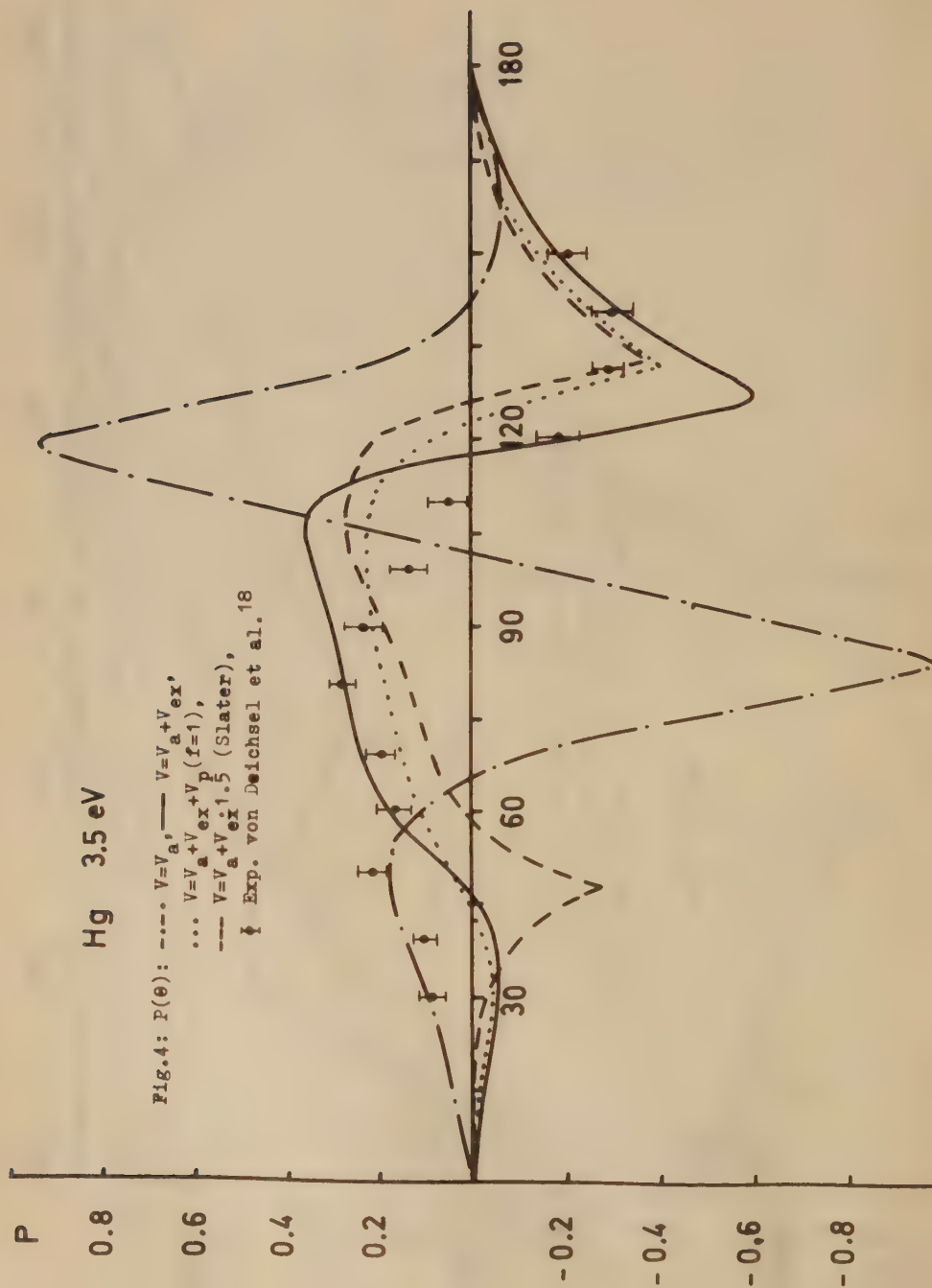






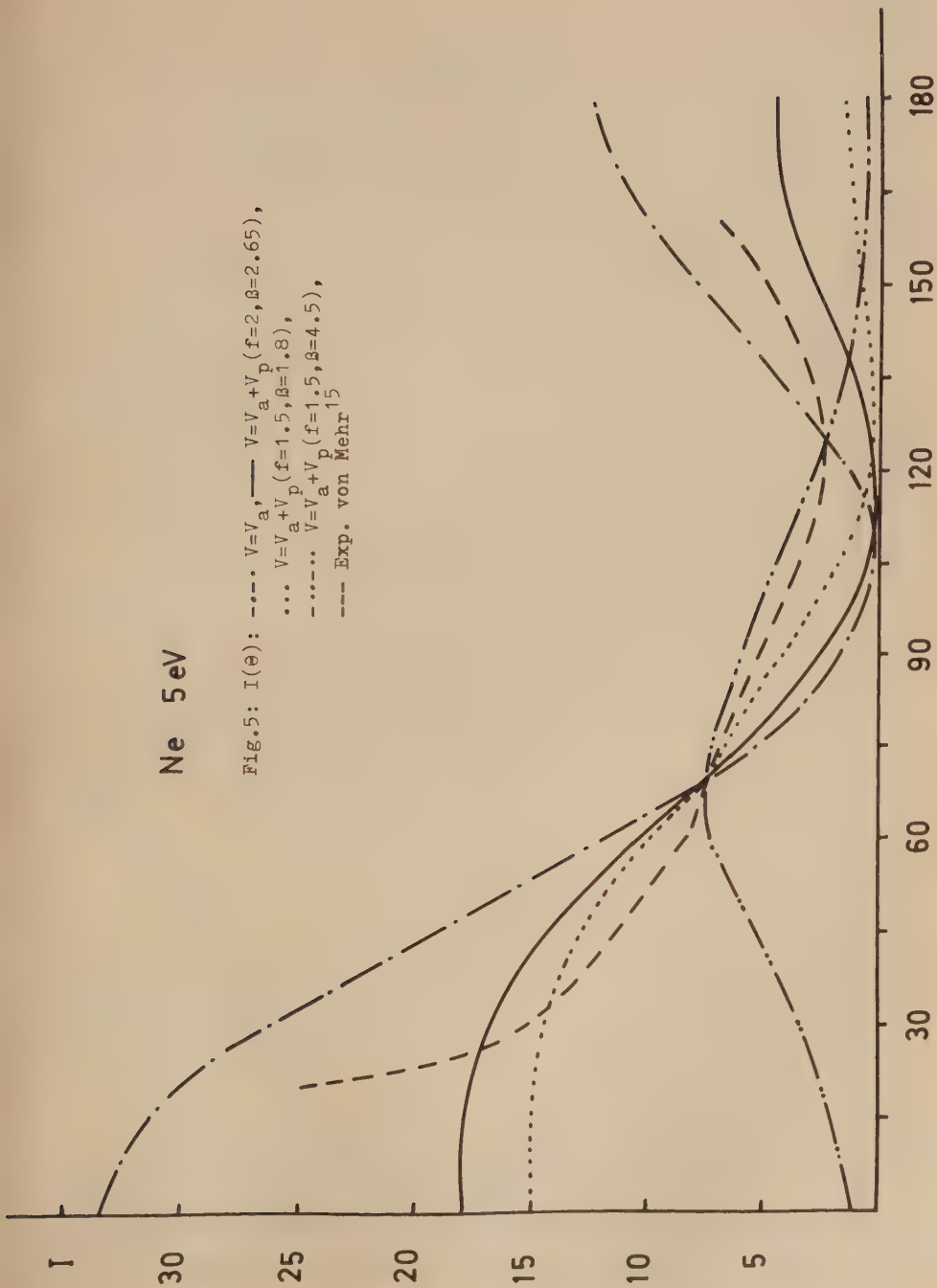
Hg 3.5 eV

Fig. 4: $P(\theta)$: - · - · - $V=V_a$, — $V=V_a+V_{ex}$,
 · · · $V=V_a+V_{ex}+V_p(f=1)$,
 - - - $V=V_a+V_{ex}+1.5$ (Slater),
 □ Exp. von Deichsel et al. 18



Ne 5 eV

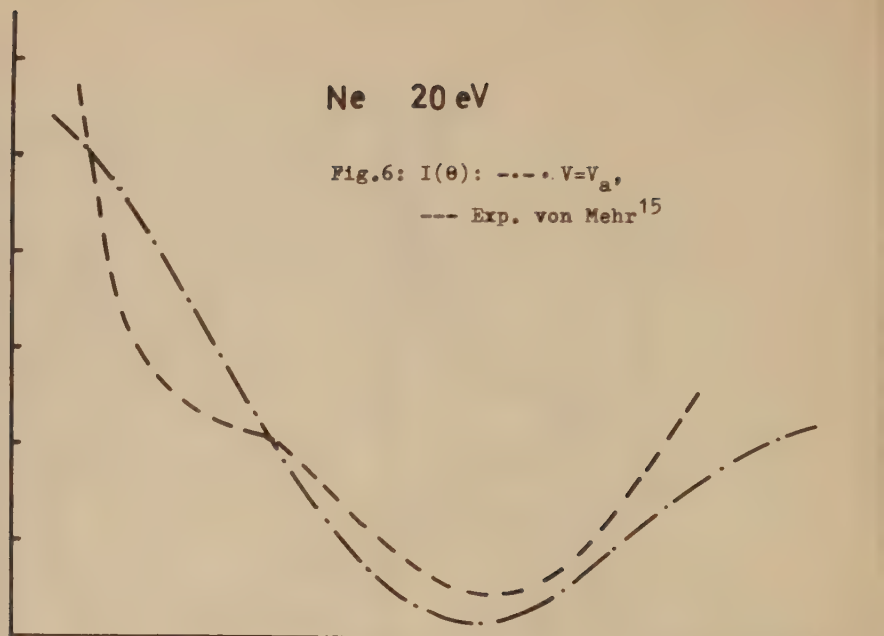
Fig.5: $I(\theta)$: -.-.- $V=V_a$, — $V=V_a+V_p$ ($f=2, \beta=2.65$),
 ... $V=V_a+V_p$ ($f=1.5, \beta=1.8$),
 -.-.- $V=V_a+V_p$ ($f=1.5, \beta=4.5$),
 --- Exp. von Mehr¹⁵



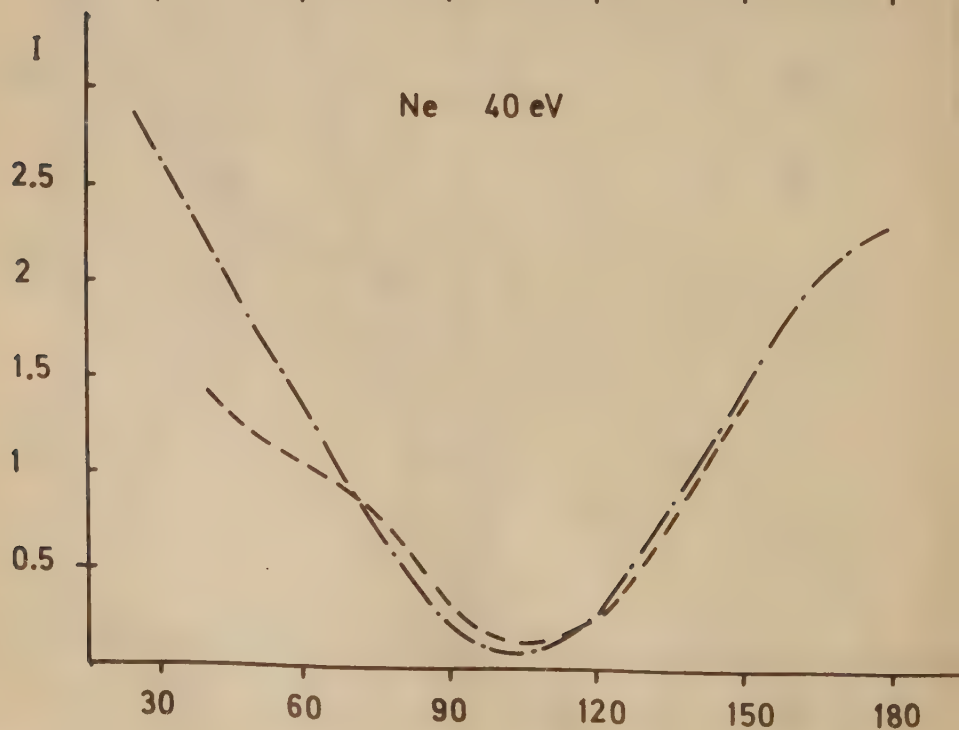
Ne 20 eV

Fig. 6: $I(\theta)$: --- $V=V_a$,

--- Exp. von Mehr¹⁵

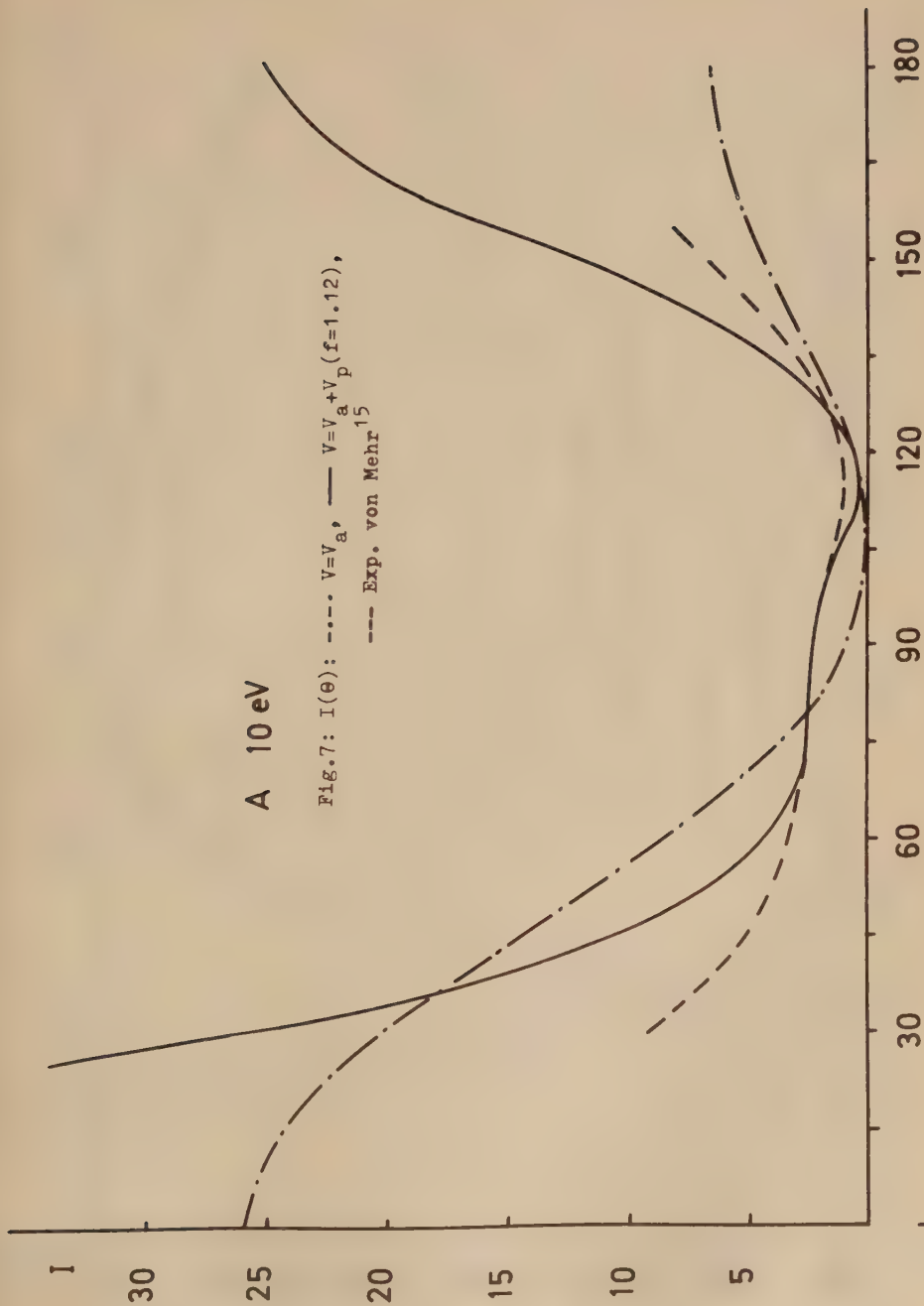


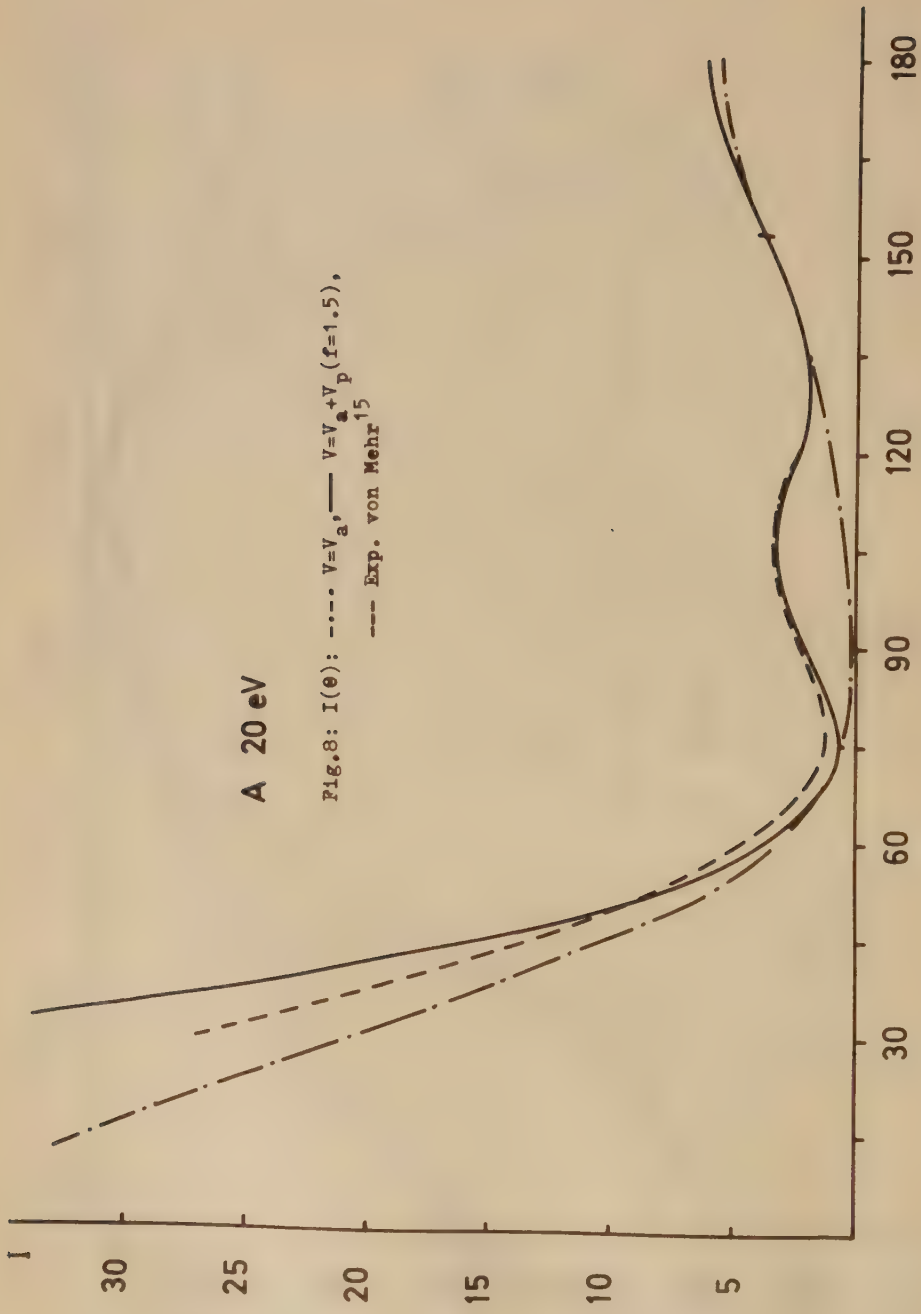
Ne 40 eV



A 10 eV

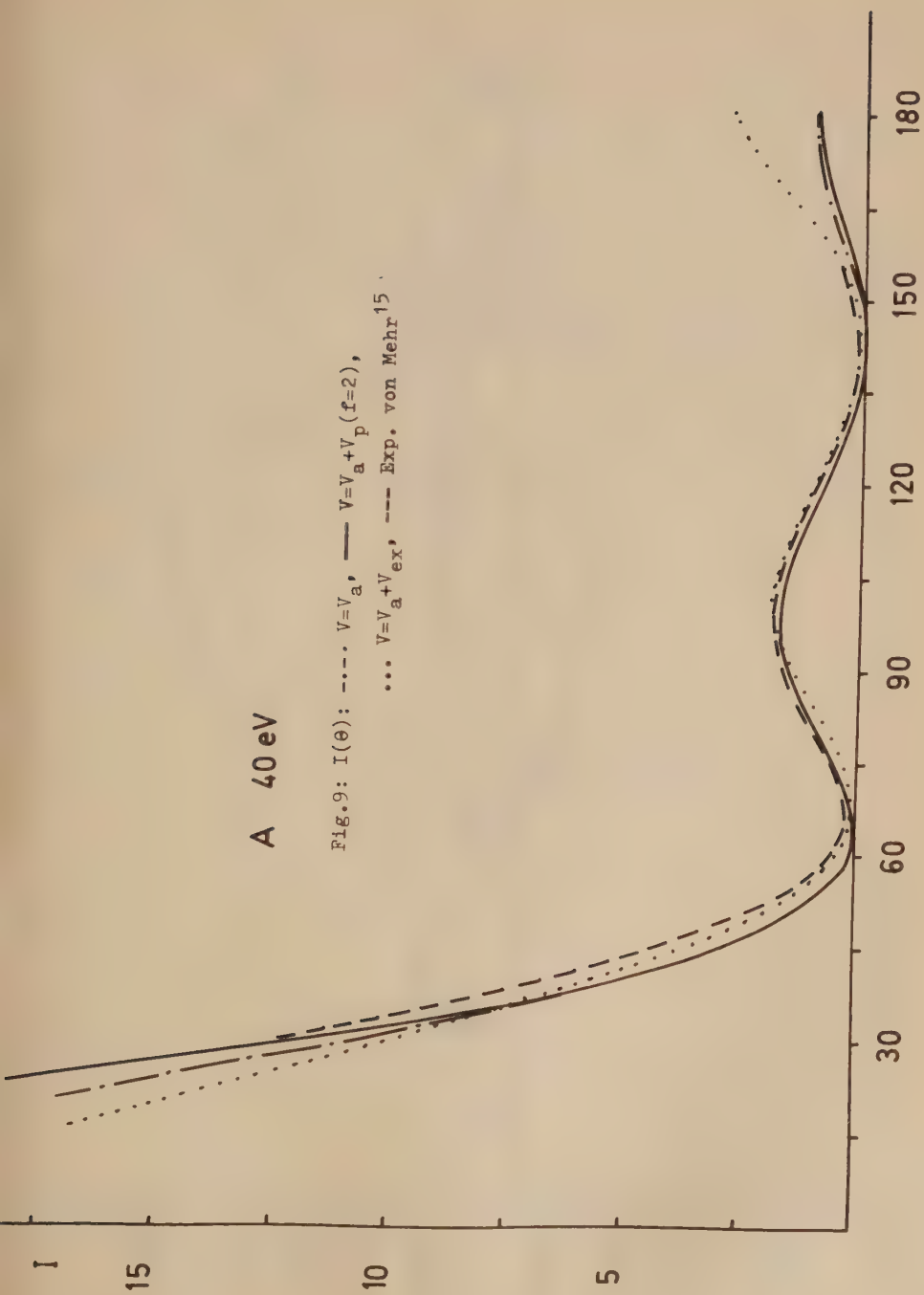
Fig.7: $I(\theta)$: -.-.- $V=V_a$, — $V=V_a+V_p$ ($f=1.12$),
 --- Exp. von Mehr¹⁵





A 20 eV

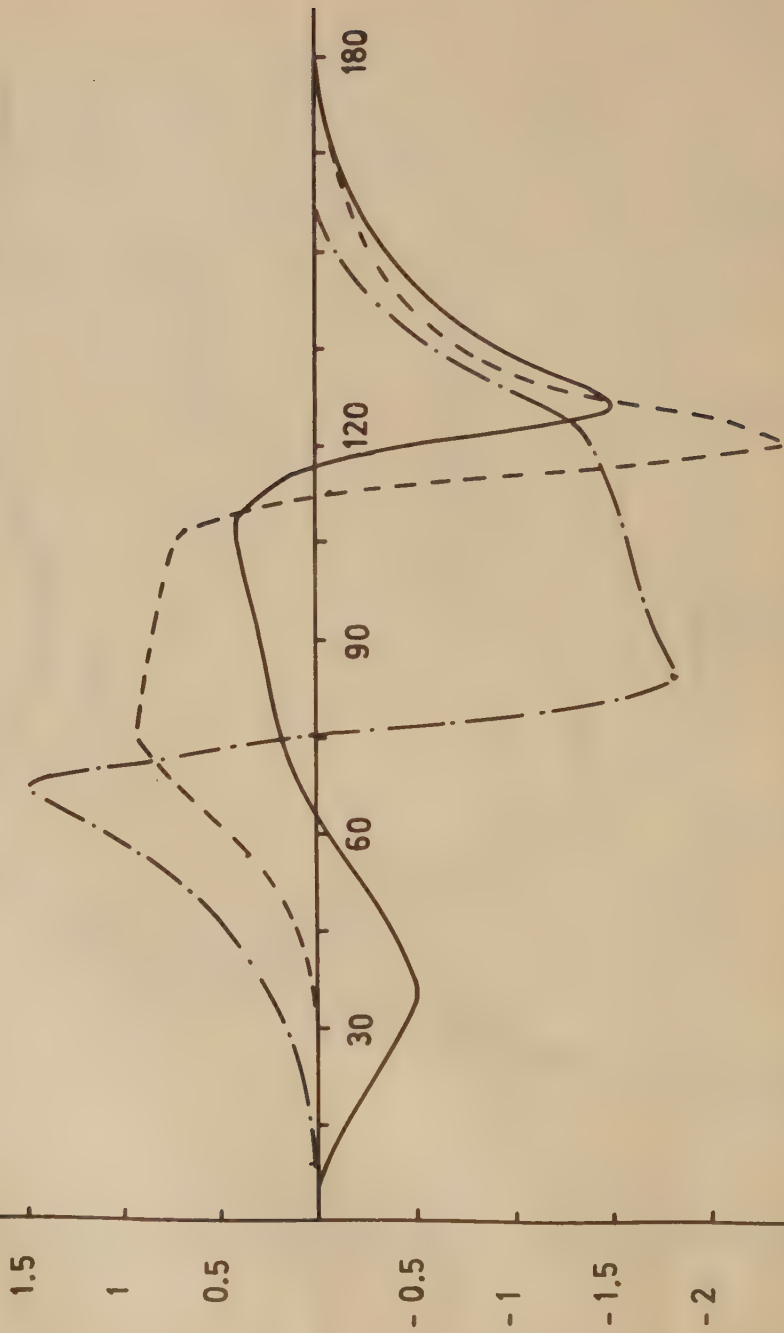
Fig. 8: $I(\theta)$: -.-.- $V = V_a$, — $V = V_a + V_p$ ($f = 1.5$),
 --- Exp. von Mehr¹⁵



A 40 eV

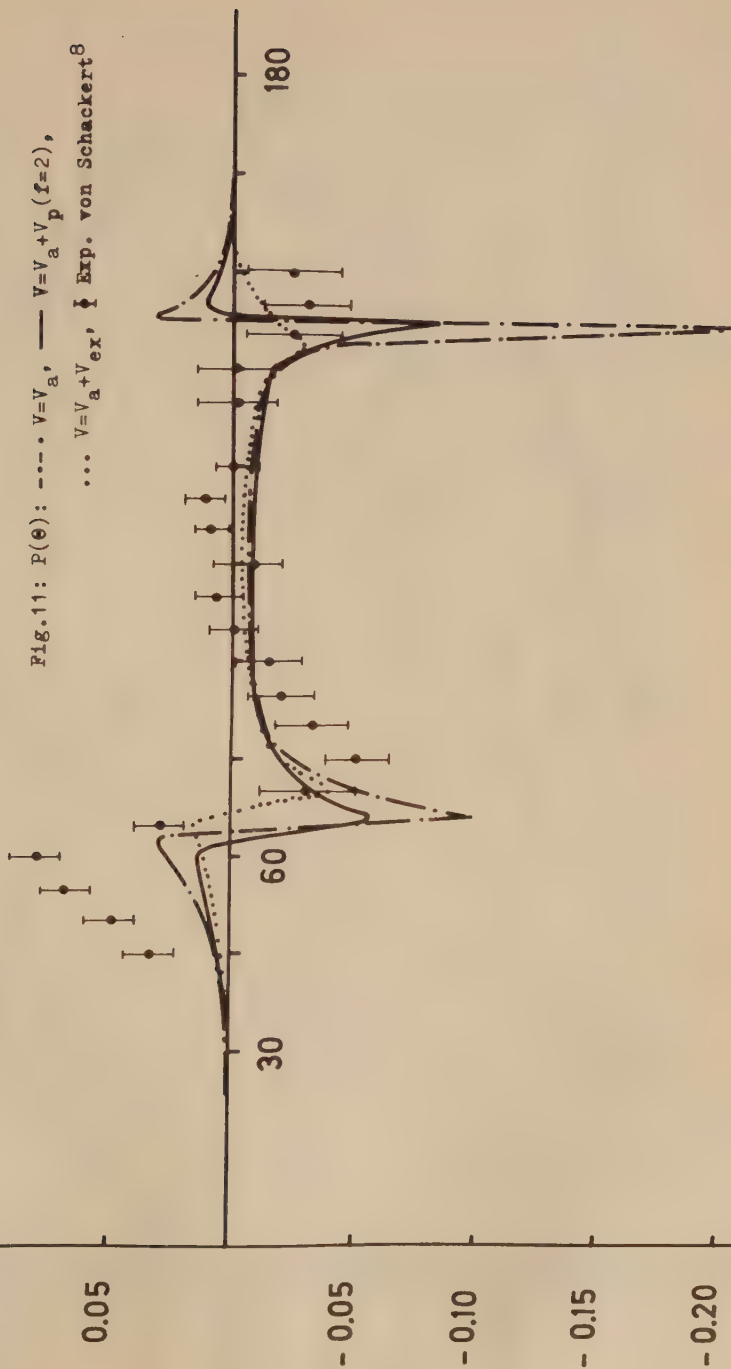
A 5, 10, 20 eV

Fig. 10: $P(\theta)$: $V=V_a+V_p$, — 5 eV ($f=1$),
 --- 10 eV ($f=1.12$), -.-.- 20 eV ($f=1.5$)



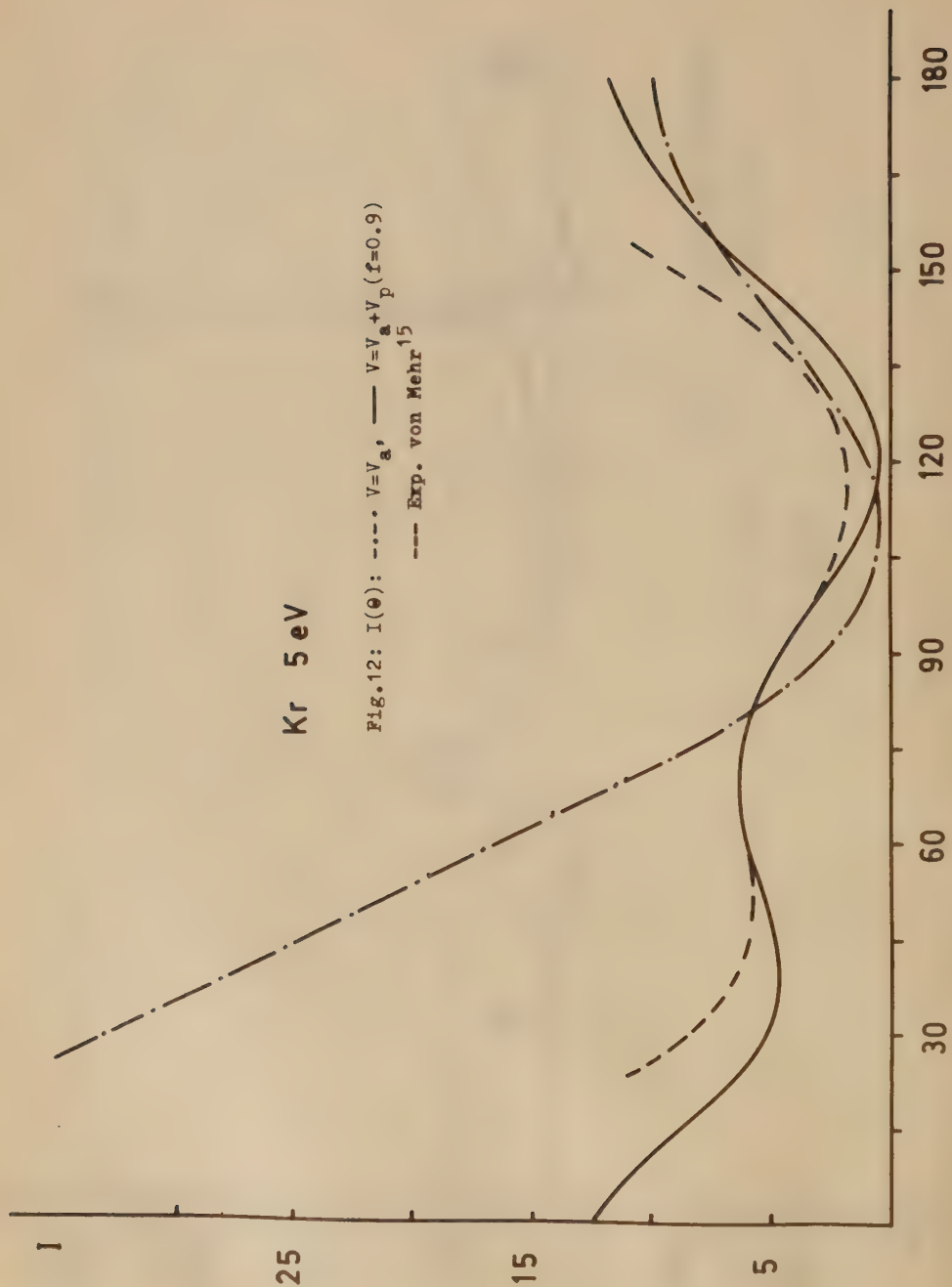
A 40 eV

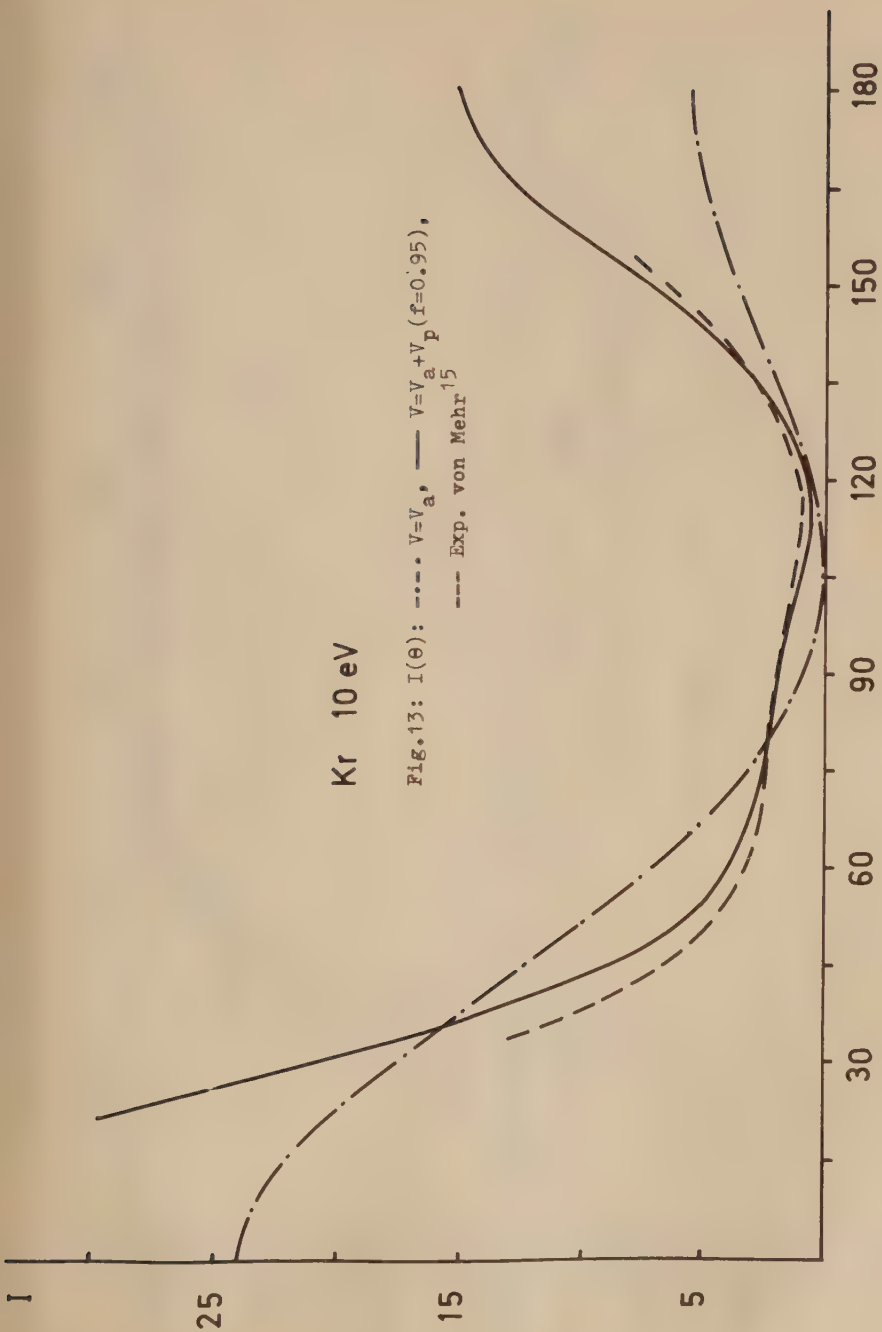
Fig. 11: $P(\theta)$: $-\cdots V=V_a$, $— V=V_a+V_p$ ($x=2$),
 $\cdots V=V_a+V_{ex}$, $\bullet$ Exp. von Schackert⁸



Kr 5 eV

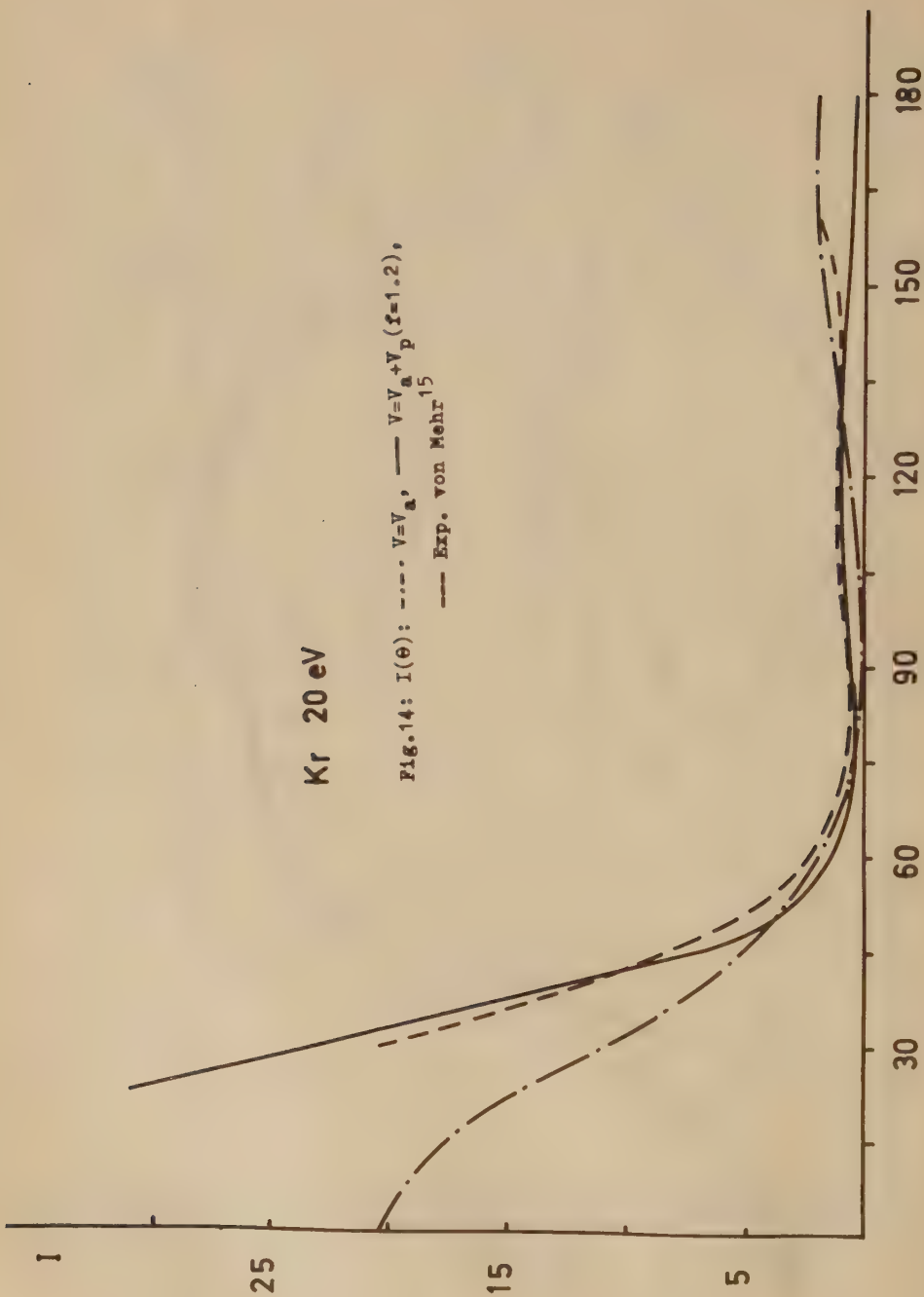
Fig.12: $I(\theta)$: -.-.- $V=V_g$, — $V=V_g+V_p$ ($f=0.9$)
 --- Exp. von Mehr¹⁵





Kr 20 eV

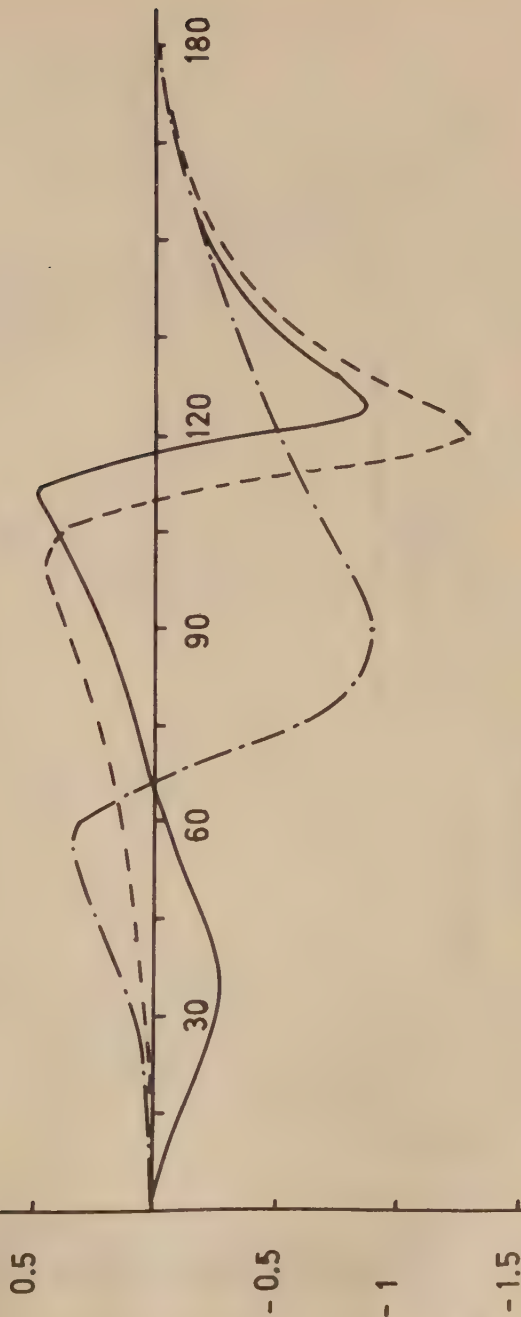
Fig. 14: $I(\theta)$: -.-.- $V=V_a$, — $V=V_a+V_p$ ($f=1.2$),
 --- Exp. von Mehr¹⁵



P·10

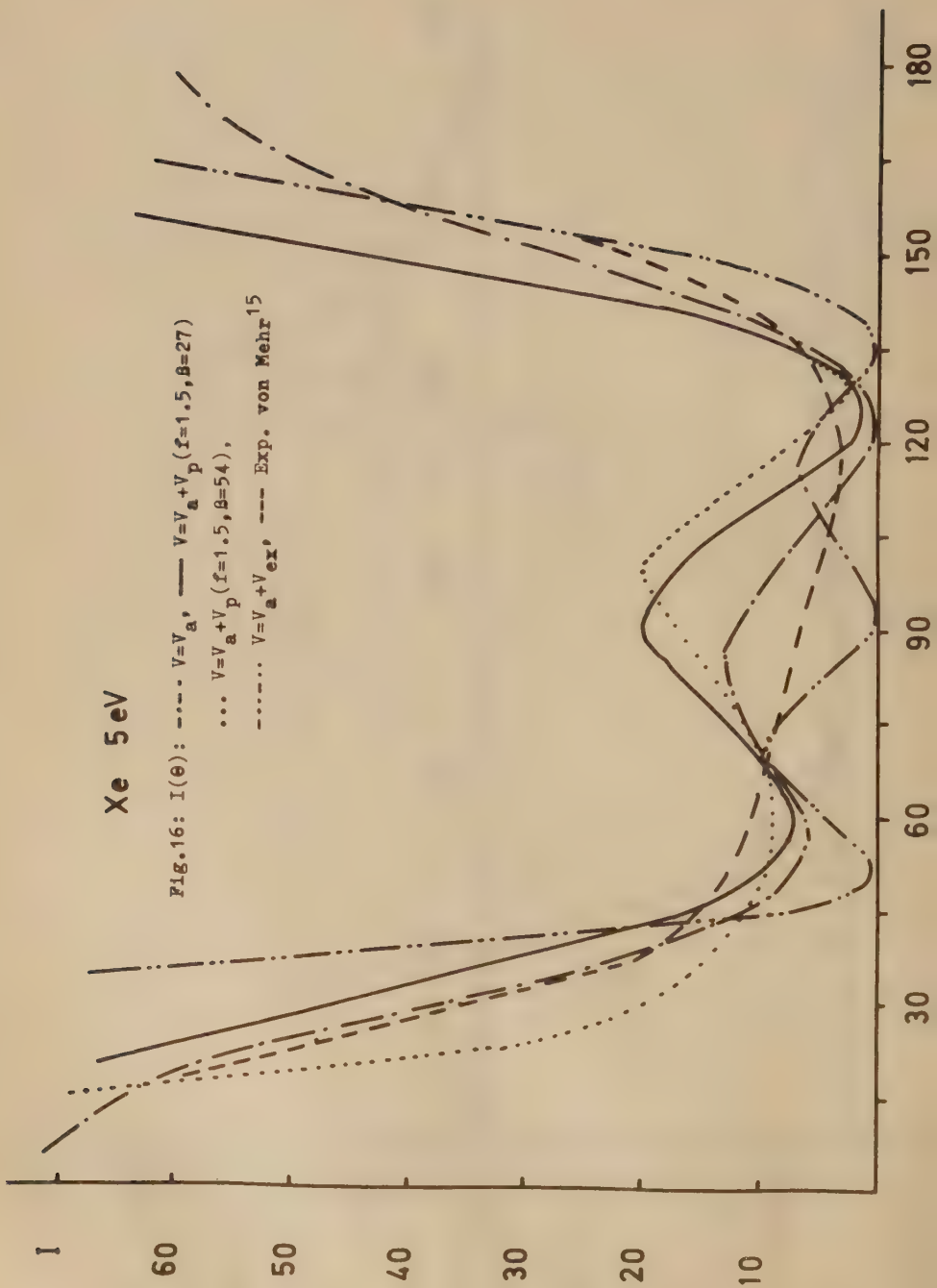
Kr 5,10,20 eV

Fig.15: $P(\theta): V=V_a+V_p$, — 5 eV ($f=0.9$),
 --- 10 eV ($f=0.95$), -.-.- 20 eV ($f=1.2$)



Xe 5eV

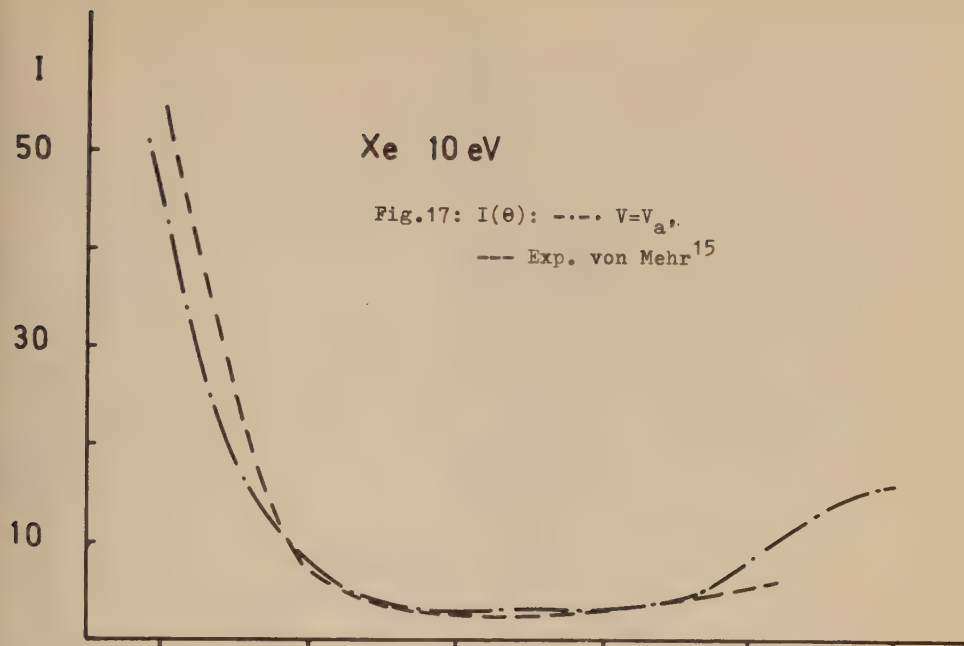
Fig. 16: $I(\theta)$: -.-.- $V=V_a$, — $V=V_a+V_p$ ($f=1.5, \beta=27$)
 ... $V=V_a+V_p$ ($f=1.5, \beta=54$),
 -.-.- $V=V_a+V_{ex}$, --- Exp. von Mehr¹⁵



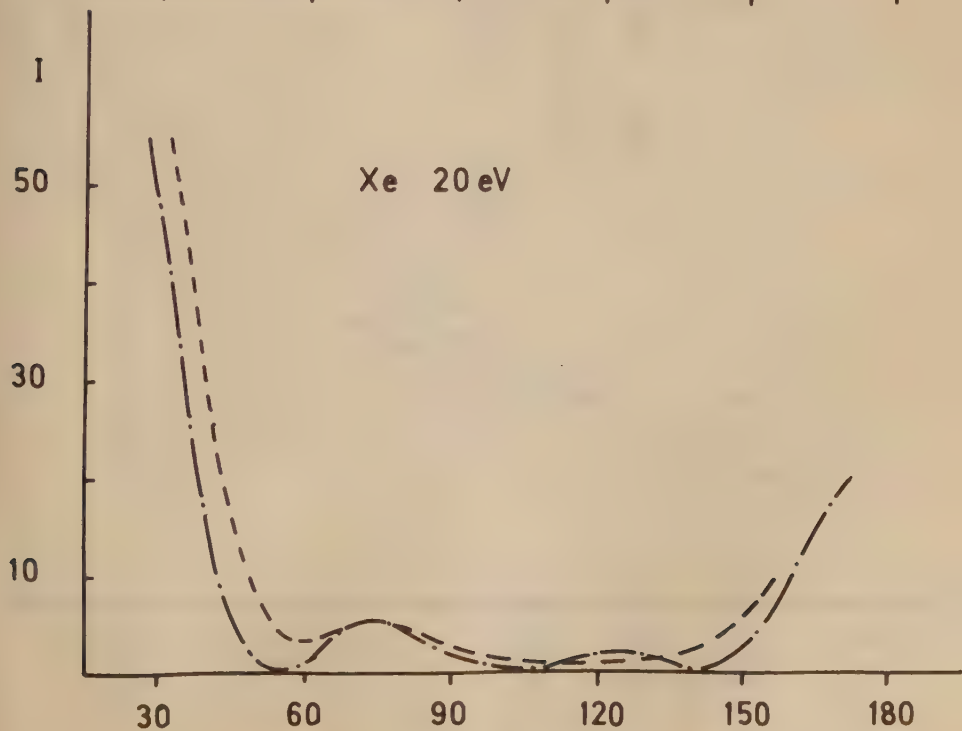
Xe 10 eV

Fig. 17: $I(\theta)$: -.-.- $V=V_a$.

--- Exp. von Mehr¹⁵

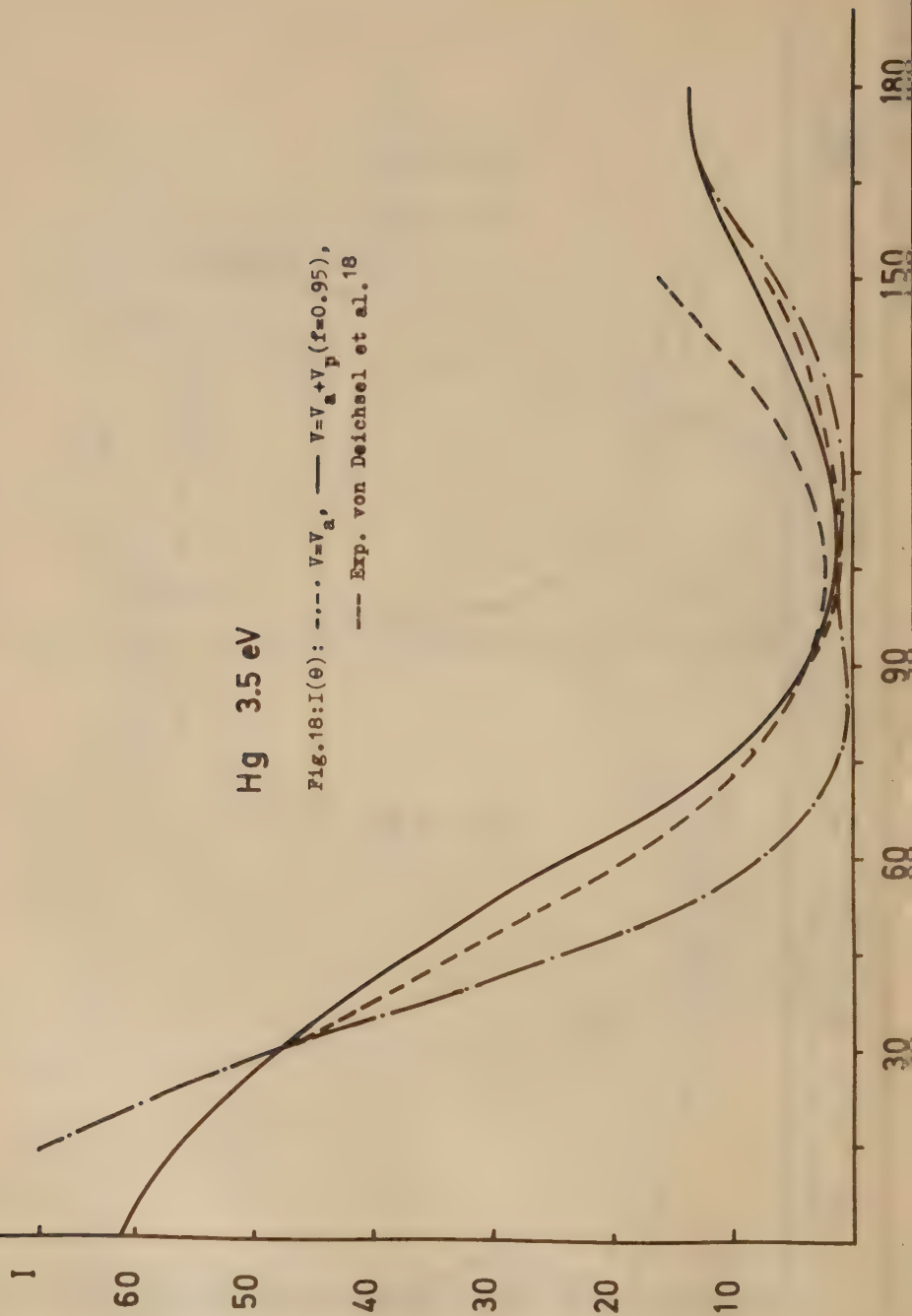


Xe 20 eV



Hg 3.5 eV

Fig. 18: $I(\theta)$: -.-.- $V=V_a$, — $V=V_a+V_p(f=0.95)$,
 --- Exp. von Deichsel et al.¹⁸

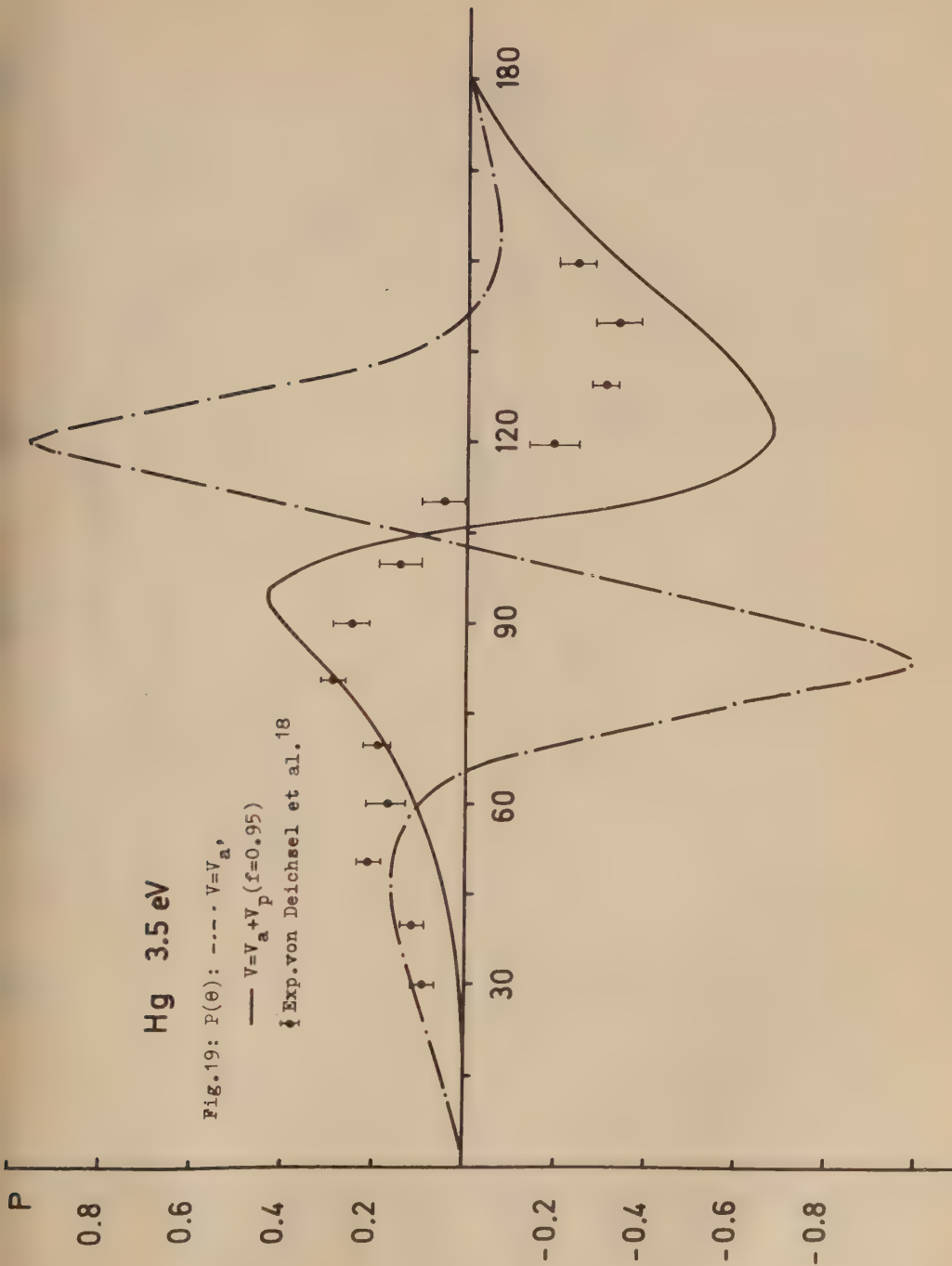


Hg 3.5 eV

Fig. 19: $P(\theta)$: - - - $V = V_a$,

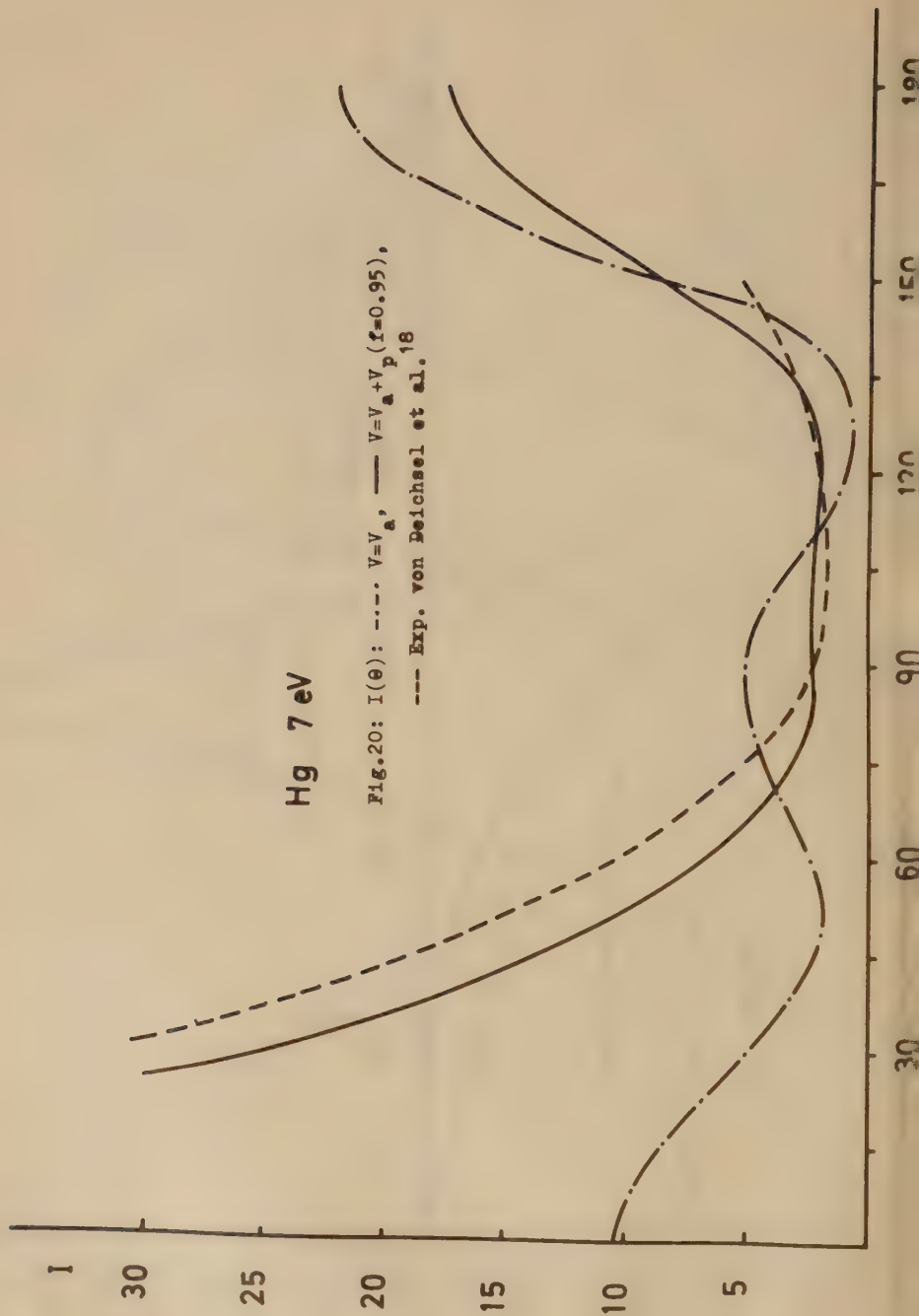
— $V = V_a + V_p$ ($f = 0.95$)

• Exp. von Deichsel et al.¹⁸



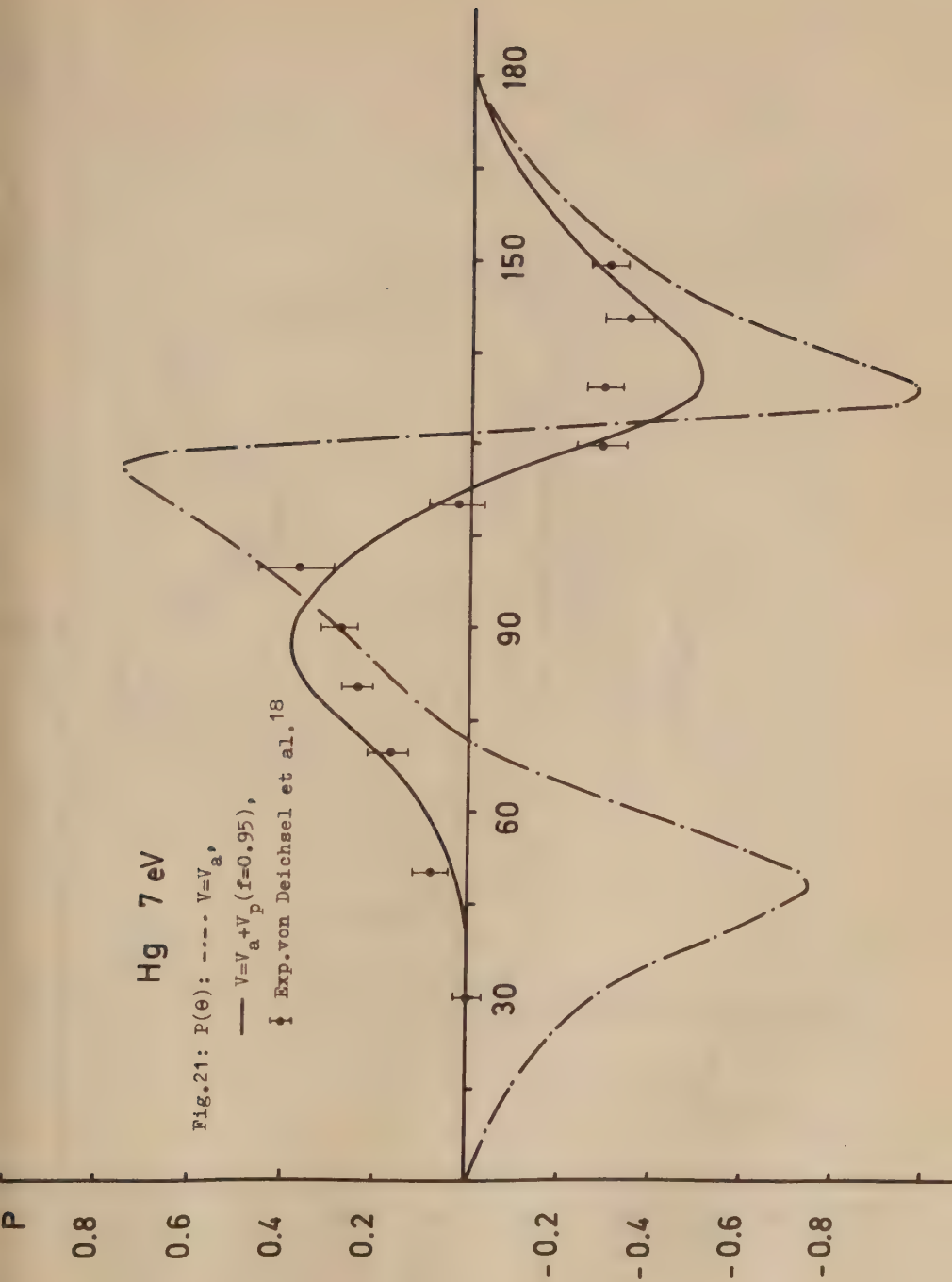
Hg 7 eV

Fig.20: $I(\theta)$: - - - $V=V_a$, — $V=V_a+V_p (f=0.95)$,
 --- Exp. von Deichsel et al.¹⁸



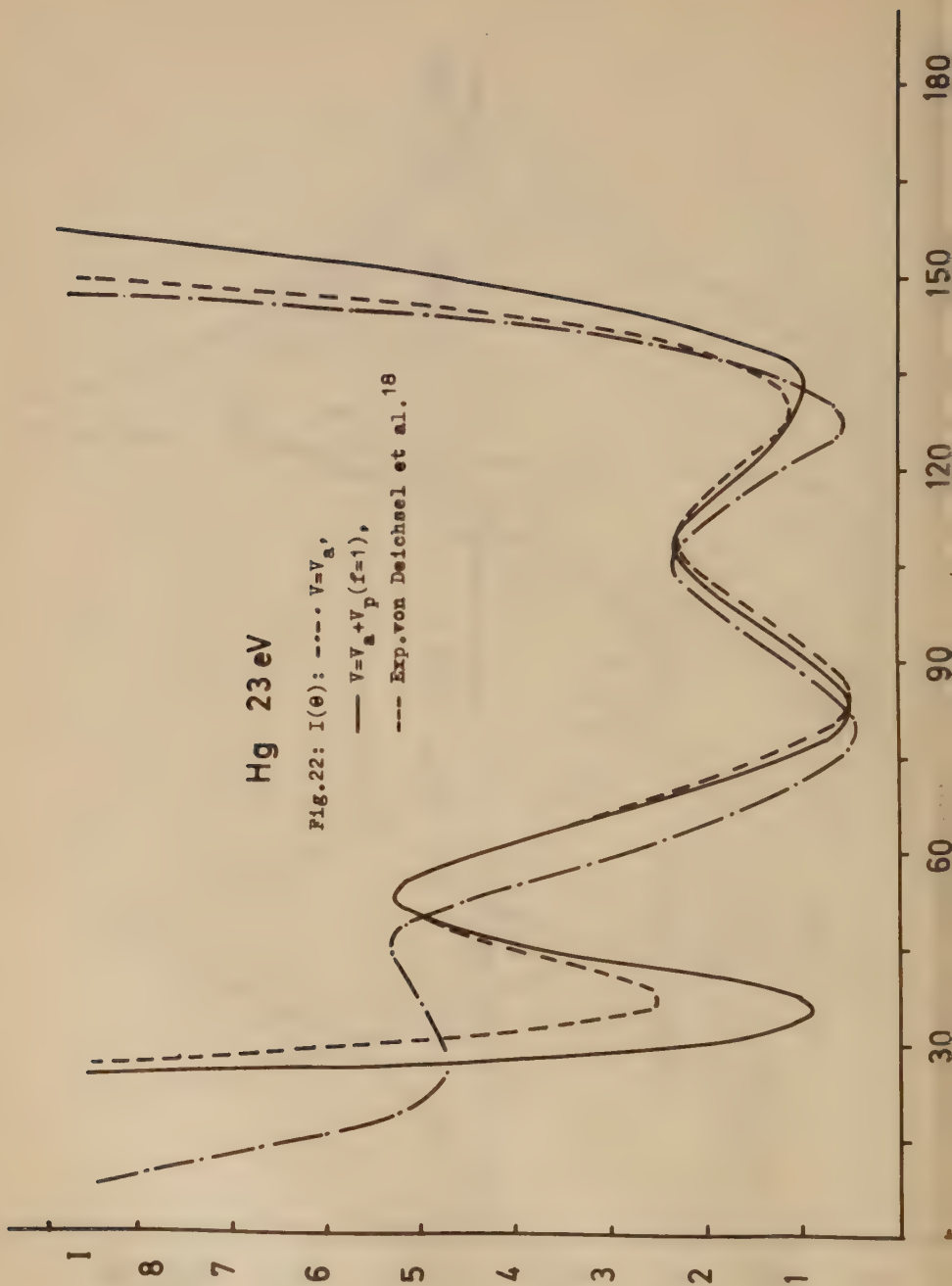
Hg 7 eV

Fig. 21: $P(\theta)$: - - - $V=V_a$,
 — $V=V_a+V_p$ ($f=0.95$),
 I Exp. von Deichsel et al.¹⁸



Hg 23 eV

Fig. 22: $I(\theta)$: - - - $V=V_a$,
 — $V=V_a + V_p (f=1)$,
 --- Exp. von Deichsel et al.¹⁸



Hg 23 eV

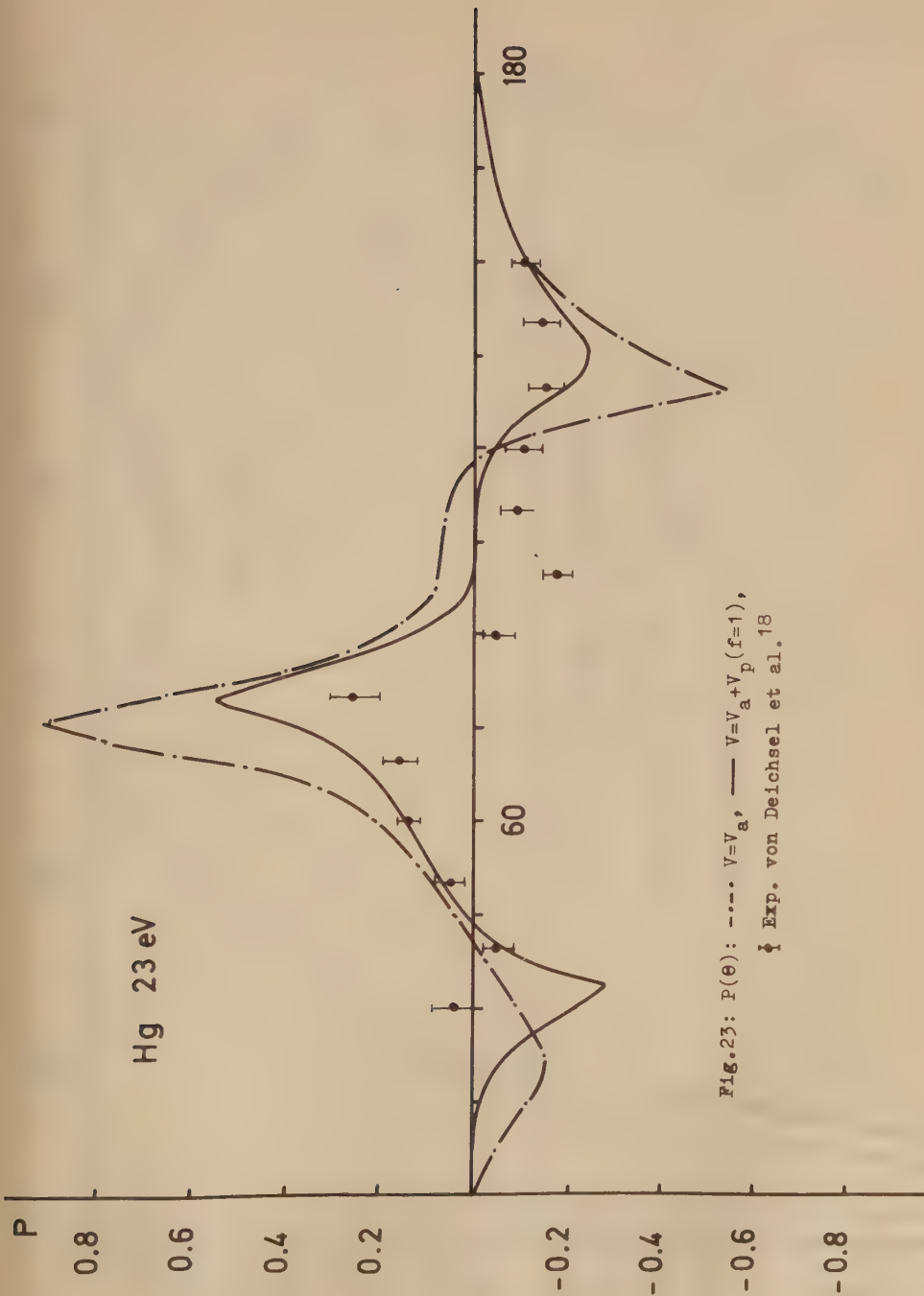
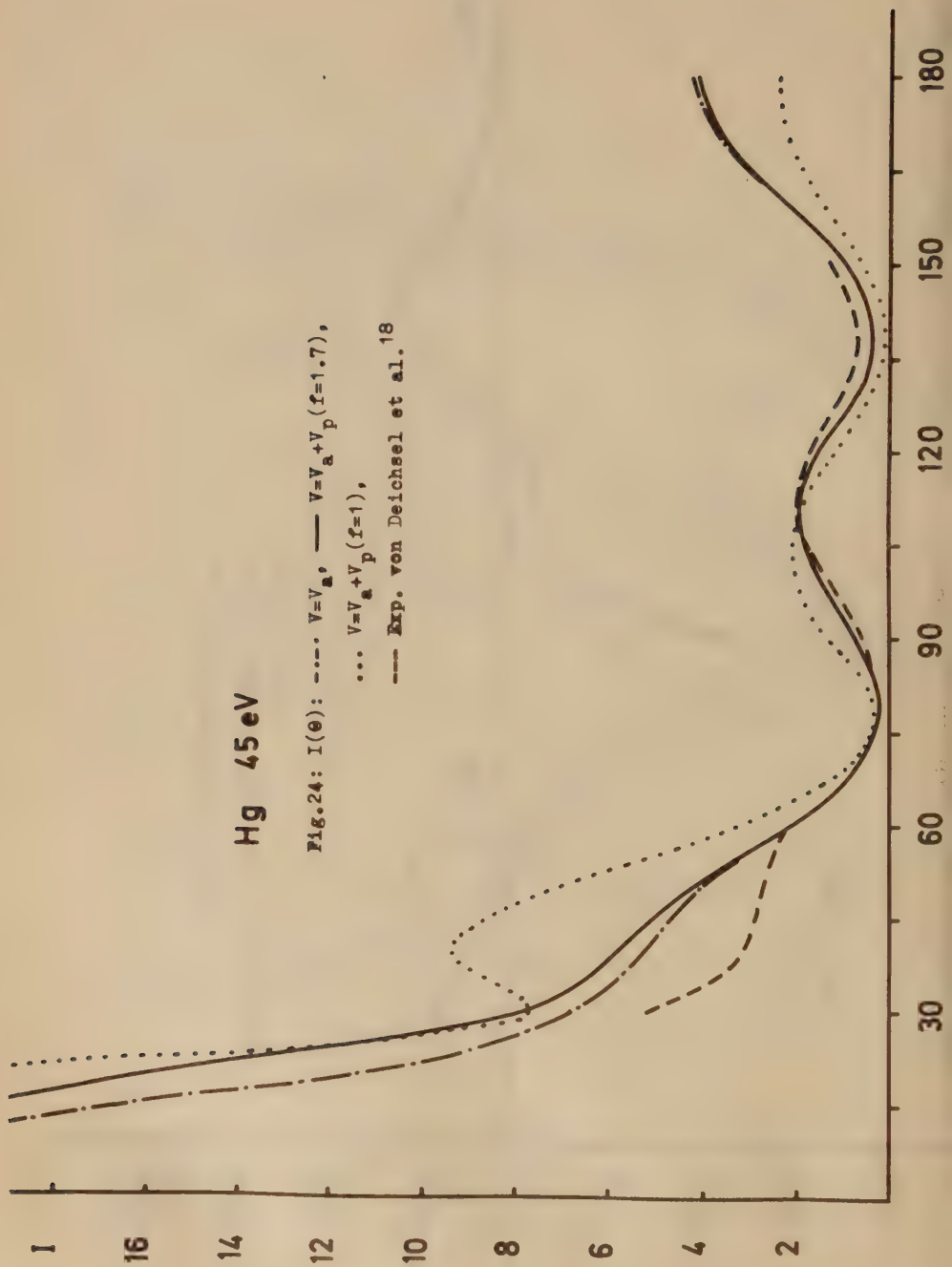


Fig. 23: $P(\theta)$: -.-.- $V = V_a$, — $V = V_a + V_p$ ($f=1$),
 $\dagger$ Exp. von Delchiel et al.¹⁸

Hg 45 eV

Fig. 24: $I(\theta)$: -.-.- $V=V_a$, — $V=V_a+V_p(f=1.7)$,
 ... $V=V_a+V_p(f=1)$,
 --- Exp. von Deichsel et al.¹⁸

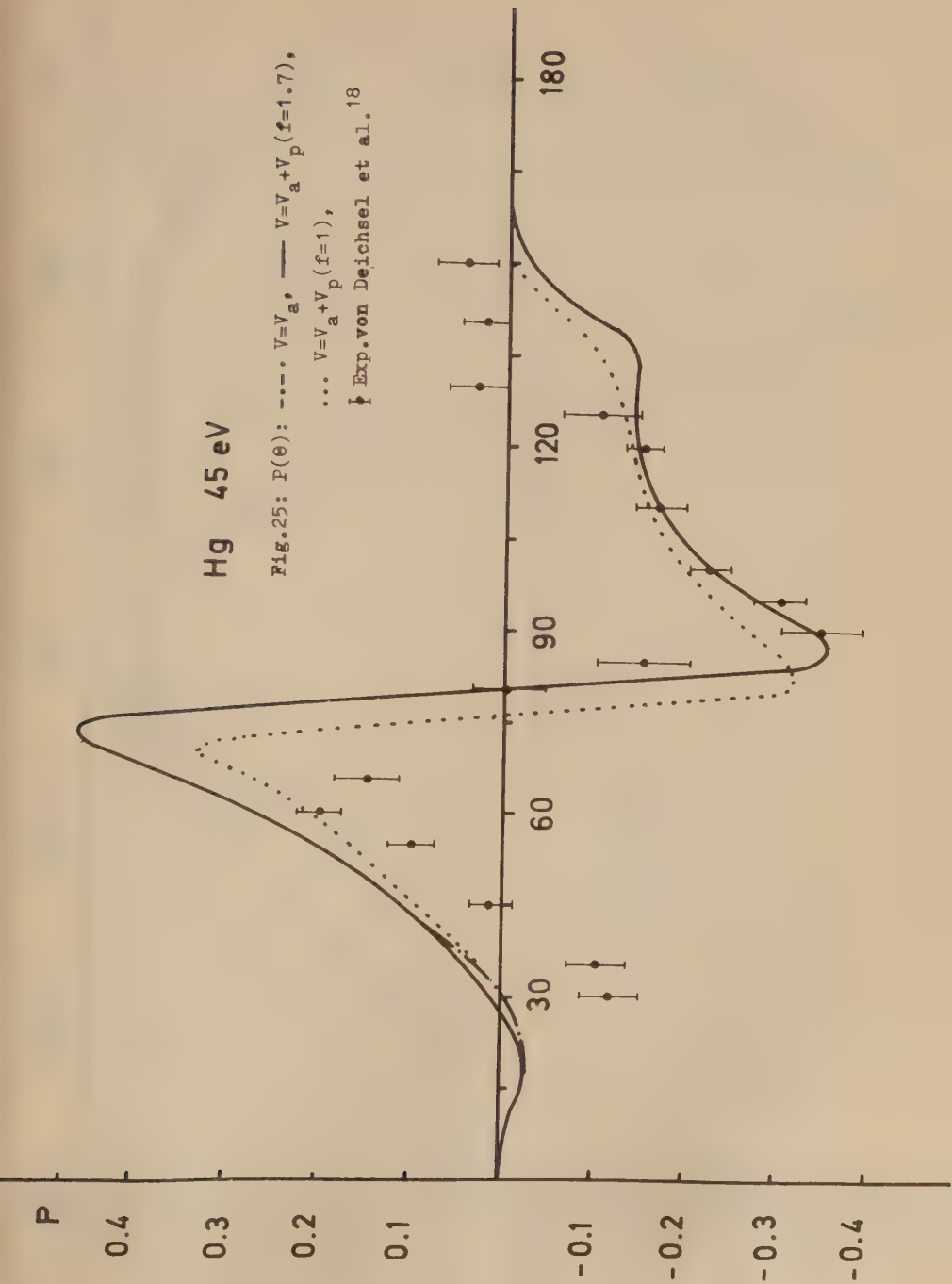


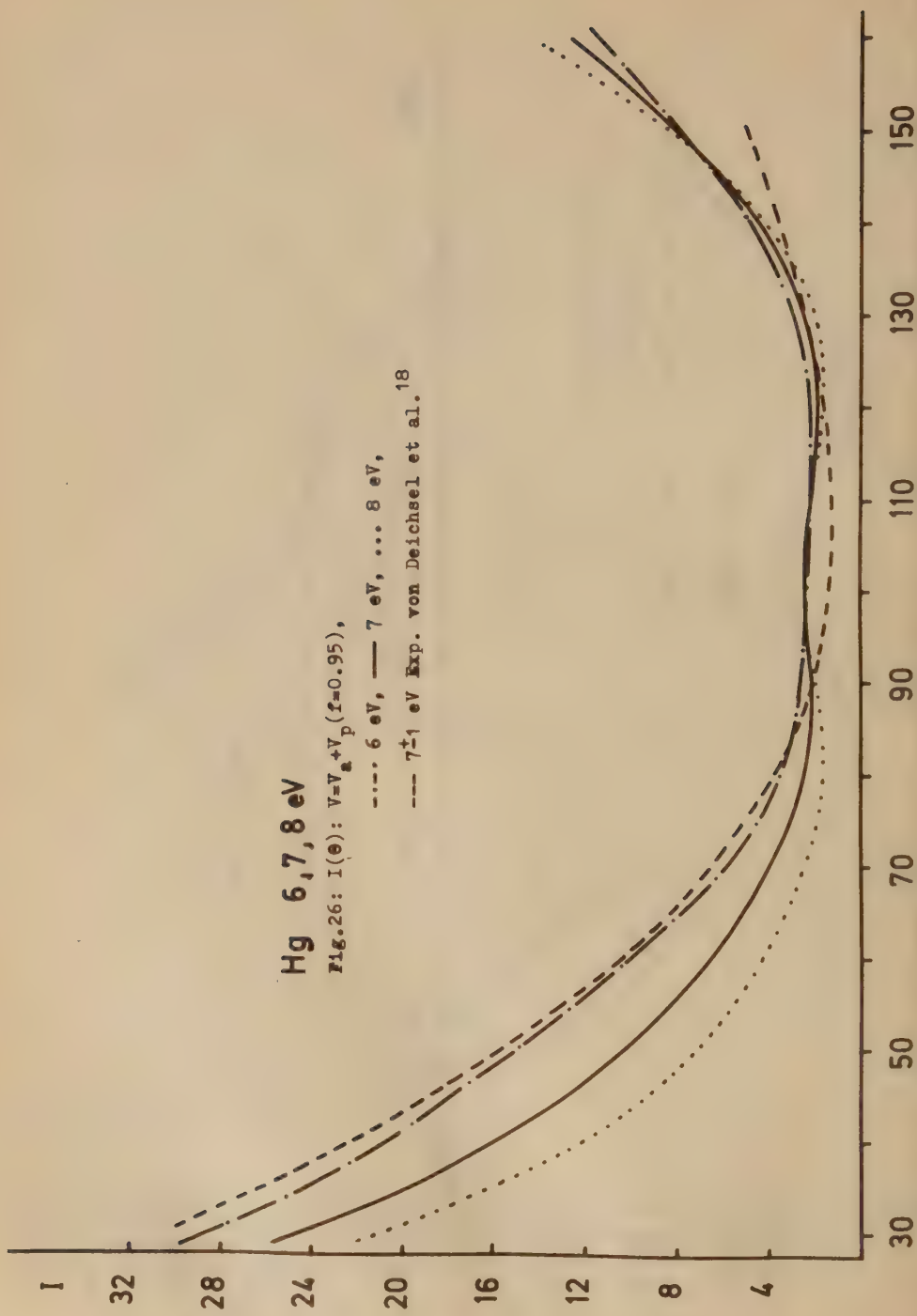
Hg 45 eV

Fig. 25: $P(\theta)$: --- $V=V_a$, — $V=V_a+V_p(f=1.7)$,

... $V=V_a+V_p(f=1)$,

Exp. von Deichsel et al.¹⁸



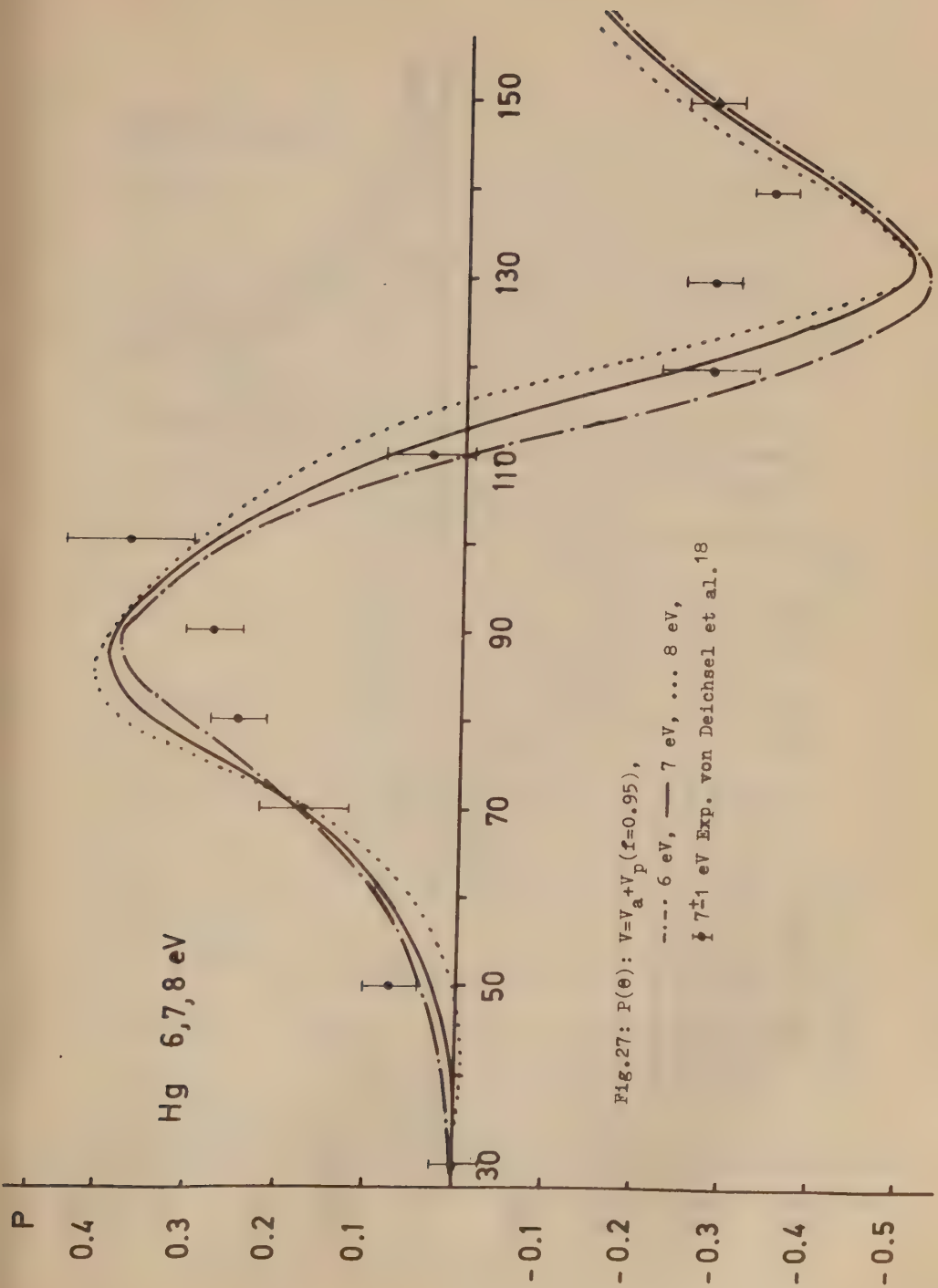


Hg 6,7,8 eV

Fig. 26: $I(\theta): V = V_g + V_p (f = 0.95)$,

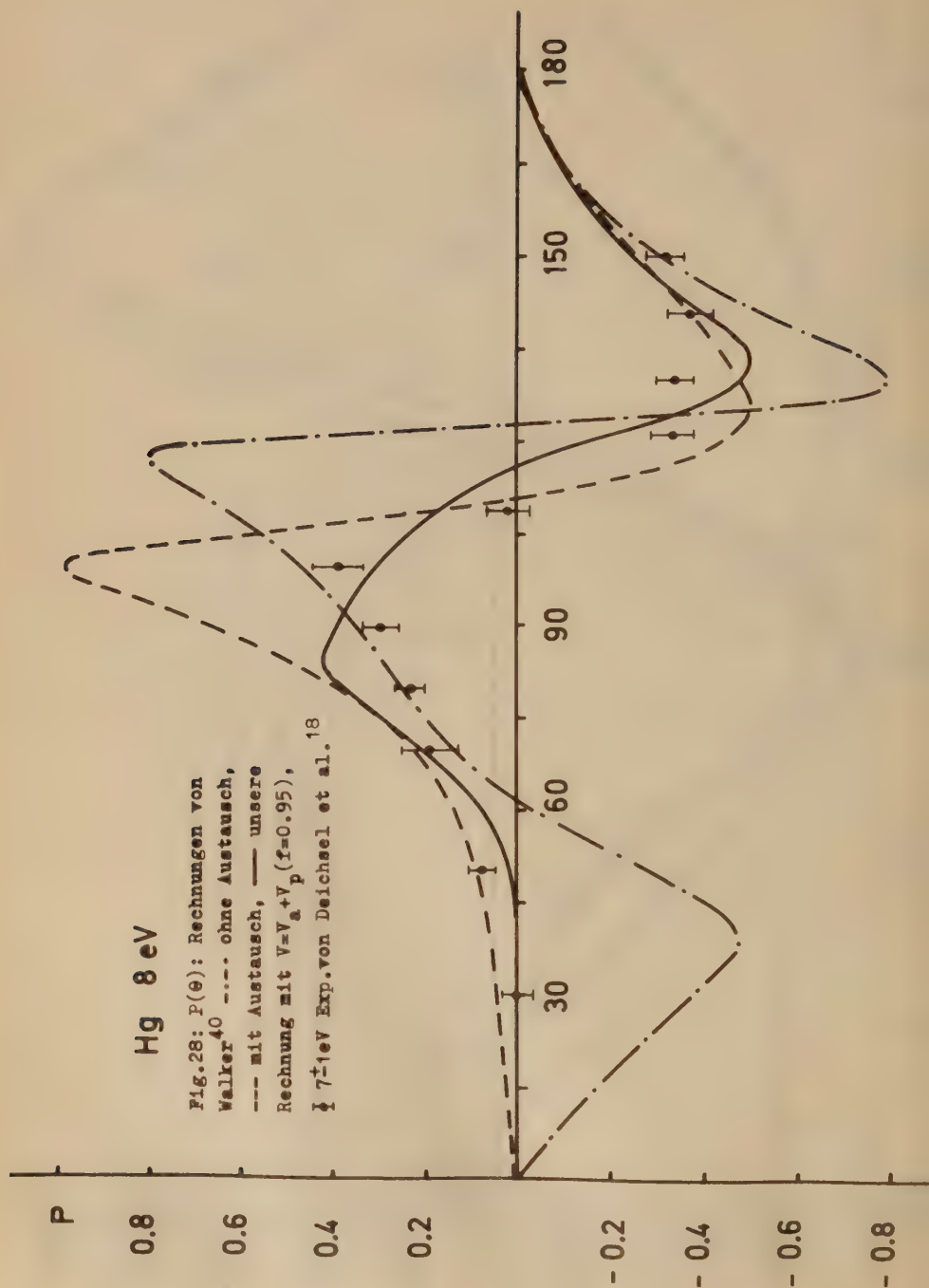
- - - 6 eV, — 7 eV, ... 8 eV,

--- 7 $\pm$ 1 eV Exp. von Deichsel et al.¹⁸



Hg 8 eV

Fig.28: $P(\theta)$: Rechnungen von Walker⁴⁰ --- ohne Austausch, --- mit Austausch, — unsere Rechnung mit $V = V_a + V_p$ ($f=0.95$), $\frac{1}{2}$ 7 $\frac{1}{2}$ -eV Exp. von Deichsel et al.¹⁸



Literaturverzeichnis.

- ¹ Kessler, J.: Electron spin polarization by low-energy scattering from unpolarized targets; Rev.Mod.Phys. 41, 3 (1969).
- ² Mott, N.F. The theory of atomic collisions, chap. IX, §4, H.S.W.Massey: 3rd ed. Oxford: Clarendon Press 1965.
- ³ Holzwarth, G. Elastic scattering of relativistic electrons by screened gold and mercury nuclei; Nucl.Phys. 59, 56 (1964).
H.J.Meister:
- ⁴ Bunyan, P.J.: The polarization by mercury of 1 to 2 keV electrons; Proc.Phys.Soc. 81, 816 (1963)
- ⁵ Bunyan, P.J. Polarization by mercury of 100 to 2000 eV; J.L.Schonfelder: Proc.Phys.Soc. 85, 455 (1965).
- ⁶ Bühring, W.: Elastic electron scattering by mercury atoms; Z.Physik 212, 61 (1968).
- ⁷ Mehr, J.: Winkelverteilungen elastisch an Edelgas-Atomstrahlen gestreuter Elektronen; Spinpolarisation eines an Argon gestreuten 40 eV-Elektronenstrahles; Z.Physik 198, 345 (1967).
- ⁸ Schackert, K.: Spinpolarisation langsamer Elektronen durch elastische Streuung an Edelgasatomstrahlen; Z.Physik 213, 316 (1968).
- ⁹ Schonfelder, J.L.: Atomic structures and electron scattering in the relativistic Hartree approximation; Proc.Phys.Soc. 87, 163 (1966).
- ¹⁰ Browne, H.M. Importance of relativistic effects in the scattering of slow electrons; Phys.Rev.Lett. 16, 495 (1966)
E.Bauer:
- ¹¹ Rotenberg, M.: Importance of relativistic effects in the scattering of slow electrons; Phys.Rev.Lett. 16, 969 (1966)
- ¹² Spruch, L.: Relativistic versus nonrelativistic scattering of slow electrons; Phys.Rev.Lett. 16, 1137 (1966).
- ¹³ Yates, A.C. Relativistic effects in electron scattering from atoms; Phys.Rev. 170, 184 (1968).
T.G.Strand:
- ¹⁴ Meister, H.J. Numerical comparison between relativistic and nonrelativistic theory for scattering of slow electrons from atoms; Z.Physik 216, 165 (1968)
H.F.Weiss:

- 15 Mehr, J.: Private Mitteilung und Dissertation, Mainz
1966
- 16 Kessler, J. Streuung von Elektronen an Hg-Atomen im
H.Lindner: Energiebereich 200-4000 eV; Z.Physik 183, 1
(1965)
- 17 Eitel, W. Range of validity of static potential ap-
K.Jost proximation in low energy electron scatter-
J.Kessler: ing checked by cross section measurements of
Hg between 25 and 150 eV; Z.Naturf. 23a, 2122
(1968)
- 18 Deichsel, H. Elektronenpolarisation im Energiebereich
E.Reichert unterhalb 50 eV an freien Hg-Atomen;
H.Steidl: Z.Physik 189, 212 (1966).
- 19 Born, M.: Optik, 2.Aufl. §49, Berlin:Springerverlag 1965
- 20 Landolt-Börnstein: Zahlenwerte und Funktionen I, 1, S.325;
Berlin:Springerverlag 1950.
- 21 Geiger, H. Handbuch der Physik, 2.Aufl., Bd.XXII/1,
K.Scheel: Kap.5; Berlin:Springerverlag 1933.
- 22 Drukarev, G.F.: The theory of electron-atom collisions, chap.8
London, New York:Academic Press 1965.
- 23 Swirles, B.: The relativistic interaction of two elec-
trons in the self-consistent field method;
Proc.Roy.Soc. A157, 680 (1936).
- 24 Mayers, D.F.: Relativistic self-consistent field calcula-
tion for mercury; Proc.Roy.Soc. A241, 93 (1957)
- 25 Froese, C.: Hartree-Fock parameters for the atoms he-
lium to radon; J.Chem.Phys. 45, 1417 (1966)
und private Mitteilung.
- 26 Clementi, E.: J.Chem.Phys. 38, 996 (1963).
- 27 Libermann, D. Self-consistent field Dirac-Slater wave func-
J.T.Waber tions for atoms and ions. I. Comparison with
D.T.Cromer: previous calculations; Phys.Rev. A137, 27 (1965)
- 28 Landau, L.D. Lehrbuch der Theoretischen Physik Bd.II,
E.M.Lifschitz: §42, Berlin:Akademischer Verlag 1966.
- 29 Garret, W.R. Elastic scattering of slow electrons from
R.A.Mann: alkali atoms; Phys.Rev. A135, 580 (1964).
- 30 Lenander, C.J. Low-energy electron scattering from atoms
and molecules: a model; Phys.Rev. 142, 1 (1966),

- 31 Slater, J.C.: A simplification of the Hartree-Fock-method; Phys. Rev. 81, 385 (1951).
- 32 Gombas, P.: Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Kap. 1, Wien: Springer-Verlag 1949.
- 33 Gaspar, R.: Über eine Approximation des Hartree-Fock'schen Potentials durch eine universelle Potentialfunktion; Acta Phys. Hung. 3, 263 (1953).
- 34 Lin, S.R.
N. Sherman
J.K. Percus: Elastic scattering of relativistic electrons by screened atomic nuclei; Nucl. Phys. 45, 492 (1963)
- 35 Cox Jr., H.L.
R.A. Bonham: Elastic electron scattering amplitudes for neutral atoms calculated using the partial-wave-method at 10, 40, 70 and 100 keV for $Z=1$ to $Z=54$; J. Chem. Phys. 47, 2599 (1962).
- 36 Ahlberg, J.H.
E.N. Nilson
J.L. Walsh: The theory of splines and their application, New York, London: Academic Press 1967.
- 37 Bulirsch, R.
J. Stoer: Numerical treatment of ordinary differential equations by extrapolation method; Num. Math. 8, 1 (1966).
- 38 Klein, M.M.
K.A. Brueckner: Interaction of slow electrons with atomic oxygen and nitrogen; Phys. Rev. 111, 1115 (1958)
- 39 Biermann, L.: Die Oszillatorenstärken einiger Linien in den Spektren des NaI, KI, und MgII; Z. Astrophysik 22, 157 (1942).
- 40 Walker, D.W.: Relativistic and exchange effects in electron scattering from mercury; J. Phys. B2, 356 (1969).

Lebenslauf.

Ich wurde am 29.2.1940 in Passau als Sohn des Lokomotivführers Georg Weiß und seiner Ehefrau Karolina, geb. Preiß geboren.

Von 1946-51 besuchte ich die Volksschule in Passau und trat dann in die dortige Oberrealschule ein, welche ich mit dem Abitur 1960 abschloß.

Im WS 1960/61 begann ich das Studium der Physik an der Universität München. Meine Lehrer waren u.a. F. Bopp, H. P. Dürr, A. Faessler, H. Gericke, K. Gottstein, W. Güttinger, W. Heisenberg, M. Koecher, W. Rollwagen, A. Schlüter, K. Stein. Am 8.3.1963 legte ich das Vordiplom ab und erhielt nach Abschluß meiner Diplomarbeit unter der Anleitung von H. J. Meister sowie der Diplomprüfung am 27.7.1966 das Diplom in Physik.

Anschließend war ich als wissenschaftlicher Mitarbeiter bei Herrn Dr. H. J. Meister in der Sektion Physik, Lehrstuhl Prof. Bopp, der Universität München tätig.

MEMORANDUM

TO : THE SECRETARY OF THE ARMY
FROM : THE CHIEF OF THE ARMY STAFF

SUBJECT: THE ARMY STAFF'S VIEW ON THE PROPOSED
REVISIONS TO THE ARMY REGULATION NO. 100

The Army Staff has carefully considered the proposed revisions to the Army Regulation No. 100, which governs the organization and functions of the Army Staff. The Staff believes that the proposed changes are generally sound and will improve the efficiency of the Staff's operations. However, certain modifications are suggested to further clarify the Staff's responsibilities and to ensure that the Staff's actions are in full accordance with the policies of the War Department.

The Staff recommends that the proposed revisions be approved, with the following modifications:

